



**SKRIPSI-TK 091383**

**KESETIMBANGAN CAIR-CAIR SISTEM TERNER  
DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + AIR DAN  
DIMETHYL CARBONATE + TERT-BUTANOL + AIR  
PADA TEMPERATUR 303,15 DAN 313,15 K**

**RIZAL WAHYU ABDILLAH**  
**NRP 2311 100 031**  
**ABDUL HADI ALBAR**  
**NRP 2311 100 186**

**Dosen Pembimbing**  
**Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng**  
**Dr. Ir. Kuswandi, DEA**

**JURUSAN TEKNIK KIMIA**  
**Fakultas Teknologi Industri**  
**Institut Teknologi Sepuluh Nopember**  
**Surabaya 2015**



**FINAL PROJECT - TK 091383**

**LIQUID-LIQUID EQUILIBRIA OF TERNARY SYSTEM  
DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + WATER  
AND DIMETHYL CARBONATE + TERT-BUTANOL +  
WATER AT TEMPERATURES 303,15 AND 313,15 K**

**RIZAL WAHYU ABDILLAH  
NRP 2311 100 031  
ABDUL HADI ALBAR  
NRP 2311 100 186**

**Advisor  
Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng  
Dr. Ir. Kuswandi, DEA**

**DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING  
Faculty of Industrial Technology  
Sepuluh Nopember Institute of Technology  
Surabaya 2015**

## LEMBAR PENGESAHAN

### KESETIMBANGAN CAIR-CAIR SISTEM TERNER DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + AIR DAN DIMETHYL CARBONATE + TERT-BUTANOL +AIR PADA 303,15 K DAN 313,15 K

Diajukan Untuk Memenuhi Salah Satu Syarat Memperoleh Gelar  
Sarjana Teknik Kimia Pada Program Studi S-1  
Jurusan Teknik Kimia  
Fakultas Teknologi Industri  
Institut Teknologi Sepuluh Nopember

Oleh

**Rizal Wahyu Abdillah**

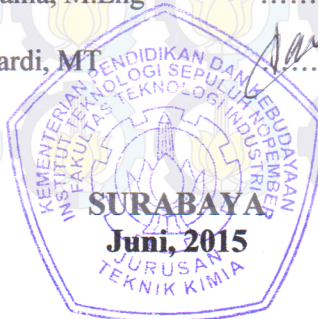
**NRP. 2311 100 031**

**Abdul Hadi Albar**

**NRP. 2311 100 186**

Disetujui oleh Tim Penguji Tugas Akhir :

1. Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M. Eng ..... (Pembimbing I)
2. Dr. Ir. Kuswandi, DEA ..... (Pembimbing II)
3. Dr. Ir. Sri Rahmania, M.Eng ..... (Penguji I)
4. Ir. Ignatius Gunardi, MT ..... (Penguji II)



## LEMBAR PENGESAHAN

### KESETIMBANGAN CAIR-CAIR SISTEM TERNER DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + AIR DAN DIMETHYL CARBONATE + TERT-BUTANOL +AIR PADA 303,15 K DAN 313,15 K

Diajukan Untuk Memenuhi Salah Satu Syarat Memperoleh Gelar  
Sarjana Teknik Kimia Pada Program Studi S-1  
Jurusan Teknik Kimia  
Fakultas Teknologi Industri  
Institut Teknologi Sepuluh Nopember

Oleh

**Rizal Wahyu Abdillah**

**NRP. 2311 100 031**

**Abdul Hadi Albar**

**NRP. 2311 100 186**

Disetujui oleh Tim Penguji Tugas Akhir :

1. Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M. Eng ..... (Pembimbing I)
2. Dr. Ir. Kuswandi, DEA ..... (Pembimbing II)
3. Dr. Ir. Sri Rahmania, M.Eng ..... (Penguji I)
4. Ir. Ignatius Gunardi, MT ..... (Penguji II)





**KESETIMBANGAN CAIR-CAIR SISTEM TERNER  
DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + AIR DAN  
DIMETHYL CARBONATE + TERT-BUTANOL + AIR  
PADA TEMPERATUR 303,15 DAN 313,15 K**

**Nama** : Rizal Wahyu Abdillah (2311 100 031)  
Abdul Hadi Albar (2311 100 186)  
**Jurusan** : Teknik Kimia ITS  
**Pembimbing** : Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng  
Dr. Ir. Kuswandi, DEA

**Abstrak**

*Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan cair-cair sistem terner DMC + Isobutanol + air dan DMC + Tert-butanol + air pada tekanan atmosfer pada suhu 303,15 dan 313,15 K. Peralatan yang digunakan dalam eksperimen ini adalah equilibrium cell 50 mL yang dilengkapi dengan jaket pemanas, Detektor Temperatur Autronics RTD Pt100 dan kontroler PID ANLY AT-502 untuk mengontrol temperatur kesetimbangan dengan akurasi  $\pm 0,1$  K. Temperatur dijaga dengan air sirkulasi yang mengalir dari waterbath ke equilibrium cell. Eksperimen dimulai dengan memasukkan 30 mL larutan terner dengan komposisi yang telah ditentukan kedalam equilibrium cell dan diaduk menggunakan magnetic stirrer selama 4 jam serta dibiarkan agar fase organik dan fase aqueous terpisah secara sempurna selama 20 jam. Kemudian masing-masing fasa dianalisa menggunakan Shimadzu Gas Chromatography 2010 Plus dengan standart deviasi 0.02% mol. Dari hasil eksperimen didapatkan bahwa kelarutan untuk sistem DMC + Isobutanol + air meningkat seiring dengan meningkatnya suhu. Sedangkan untuk sistem DMC + Tert-Butanol + air kenaikan suhu tidak berpengaruh secara signifikan pada kelarutan. Hasil eksperimen dikorelasikan dengan baik dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC dengan nilai Root Mean Square Deviation masing-masing sebesar 0.7 dan.*

**Kata kunci:** Kesetimbangan cair-cair, DMC, Isobutanol, Tert-butanol, Air, NRTL, UNIQUAC



# LIQUID-LIQUID EQUILIBRIUM OF THE TERNARY SYSTEM DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + WATER AND DIMETHYL CARBONATE +TERT- BUTANOL + WATER AT 303.15 AND 313.15 K

**Name** : Rizal Wahyu Abdillah (2311 100 031)  
Abdul Hadi Albar (2311 100 186)  
**Department** : Chemical Engineering, ITS  
**Advisor** : Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng  
Dr. Ir. Kuswandi, DEA

## Abstract

*The objective of this study was to determine experimentally ternary liquid-liquid equilibrium data for DMC + Isobutanol + water and DMC + Tert-butanol + water systems at atmospheric pressure and temperatures of 303.15 and 313.15 K. The main experimental apparatus are 50 ml equilibrium cell equipped with heating jacket, Autonics RTD Pt100 temperature detector and PID controller ANLY AT-502 to control equilibrium temperature with accuracy of  $\pm 0.1$  K. Temperature was controlled by circulating water from waterbath to equilibrium cell. The experiment was started by adding certain composition of 30 ml ternary mixture into equilibrium cell and stirred by magnetic stirrer for 4 hours and to be allowed organic and aqueous phases separated well at equilibrium condition for 20 hours. The composition of each phase were analyzed using Shimadzu Gas Chromatography 2010 Plus with standard deviation of 0.02 % mol. From the experiments result was found that the solubility increase with increasing temperature studied for DMC + Isobutanol + water system. However for DMC + Tert-butanol + water system temperature has no significant effect on solubility. The experimental data were correlated well using NRTL and UNIQUAC equations with 0.7 and 0.6 average Root Mean Square Deviation, respectively.*

**Keywords:** Liquid-liquid equilibrium, DMC, Isobutanol, Tert-Butanol, Water, NRTL, UNIQUAC.





## KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, puji syukur kehadiran Allah SWT. yang selalu melimpahkan rahmat dan karunia-Nya sehingga kami dapat menyelesaikan laporan skripsi yang berjudul **“KESETIMBANGAN – CAIR-CAIR SISTEM TERNER DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + AIR DAN DIMETHYL CARBONATE + TERT-BUTANOL + AIR PADA TEMPERATUR 303,15 DAN 313,15 K”** tepat pada waktunya. Tugas akhir ini disusun sebagai salah satu syarat untuk menyelesaikan studi program Strata-1 di Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember, Surabaya.

Penulis menyadari dalam penyusunan Skripsi ini tidak akan selesai tanpa bantuan dari berbagai pihak. Oleh karena itu pada kesempatan ini kami ingin mengucapkan terima kasih kepada :

1. Bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng, selaku Kepala Laboratorium Thermodinamika Teknik Kimia sekaligus Dosen Pembimbing Utama atas semua bimbingan dan motivasi yang diberikan.
2. Bapak Dr. Ir. Kuswandi, DEA., selaku Dosen Pembimbing kedua atas bimbingan, saran dan motivasi yang diberikan.
3. Bapak Prof. Dr. Ir. Tri Widjaja, M.Eng. selaku Ketua Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember Surabaya
4. Bapak dan Ibu Dosen Jurusan Teknik Kimia FTI – ITS yang telah memberikan ilmunya kepada penulis.
5. Seluruh civitas akademika Jurusan Teknik Kimia FTI - ITS yang telah memberikan dukungan moril kepada penulis
6. Orang tua serta saudara-saudara kami, atas do'a, bimbingan, perhatian, serta kasih sayang yang selalu tercurah selama ini.

7. Keluarga besar Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS), khususnya keluarga angkatan 2011 dan teman-teman seangkatan di Laboratorium Termodinamika Teknik Kimia, Jurusan Teknik Kimia, FTI-ITS atas semua dukungan, semangat, serta kerjasamanya.

Kami menyadari laporan skripsi ini tidak luput dari berbagai kekurangan, untuk itu penulis mengharapkan saran dan kritik demi kesempurnaan dan perbaikannya. Akhirnya laporan skripsi ini dapat memberikan sumbangan bagi pembaca.

Surabaya, 11 Juni 2015

Penyusun



## DAFTAR ISI

|  |      |
|--|------|
| HALAMAN JUDUL  | i    |
| HALAMAN PENGESAHAN                                       | v    |
| ABSTRAK  | vii  |
| KATA PENGANTAR   | xi   |
| DAFTAR ISI   | xiii |
| DAFTAR TABEL   | xv   |
| DAFTAR GAMBAR  | xvii |
| <b>BAB I PENDAHULUAN</b>                                 |      |
| 1.1 Latar Belakang                                       | 1    |
| 1.2 Perumusan Masalah                                    | 4    |
| 1.3 Tujuan Penelitian                                    | 5    |
| 1.4 Manfaat Penelitian                                   | 6    |
| <b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b>                           |      |
| 2.1 Tinjauan Penelitian                                  | 7    |
| 2.2 Isobutanol   | 9    |
| 2.3 Tert-butanol   | 9    |
| 2.4 Dimethyl Carbonate (DMC)                             | 10   |
| 2.5 Kesetimbangan cair-cair (LLE)                        | 10   |
| 2.6 Korelasi Koefisien Aktifitas Fase Cair               | 12   |
| 2.6.1 Model Persamaan NRTL (Non Random Two Liquid)       | 12   |
| 2.6.2 Model Persamaan UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical) | 14   |
| 2.7 Perhitungan Deviasi Hasil Eksperimen dan Prediksi    | 15   |
| 2.8 Korelasi Bachman-Brown                               | 16   |
| <b>BAB III METODOLOGI PENELITIAN</b>                     |      |
| 3.1 Peralatan Eksperimen                                 | 17   |
| 3.2 Bahan Yang Digunakan                                 | 18   |
| 3.3 Scope Penelitian                                     | 18   |

|        |  |    |
|--------|--|----|
| 3.4    | Prosedur Eksperimen                    | 19 |
| 3.4.1  | Eksperimen                             | 19 |
| 3.4.2  | Analisa                                | 19 |
| 3.5    | Diagram Alir Metodologi Penelitian     | 20 |
| 3.5.1  | Diagram Alir Metode Penelitian         | 20 |
| 3.5.2  | Diagram Blok Perhitungan Koefisien     |    |
|        | Aktifitas dan <i>Fitting</i> Parameter | 20 |
| BAB IV | HASIL DAN PEMBAHASAN                   |    |
| 4.1    | Hasil dan Pembahasan Eksperimen        | 25 |
| 4.2    | Hasil Prediksi Keseimbangan            | 32 |
| 4.2.1  | Penentuan Parameter                    | 32 |
| 4.2.2  | Korelasi dan Data Keseimbangan         | 34 |
| BAB V  | KESIMPULAN                             | 35 |
|        | DAFTAR PUSTAKA                         | 37 |
|        | DAFTAR NOTASI                          | 41 |
|        | APPENDIKS                              | 43 |
|        | LAMPIRAN                               | 57 |

## DAFTAR TABEL

|           |  |    |
|-----------|--|----|
| Tabel 1.1 | Nilai RON untuk Isomer Butanol   | 4  |
| Tabel 2.1 | Properti Isobutanol  | 9  |
| Tabel 2.2 | Properti Tert-butanol  | 9  |
| Tabel 2.3 | Properti Dimethyl Carbonate  | 10 |
| Tabel 4.1 | Data Eksperimen Keseimbangan Cair-Cair<br>Sistem Dimethyl Carbonate(1) +<br>Isobutanol(2) + air (3)    | 27 |
| Tabel 4.2 | Data Eksperimen Keseimbangan Cair-Cair<br>Sistem Dimethyl Carbonate(1) + Tert-<br>butanol(2) + air (3) | 28 |
| Tabel 4.3 | Bachman-Brown parameter  | 29 |
| Tabel 4.4 | UNIQUAC Parameter Luas dan Volume  | 32 |
| Tabel 4.5 | Hasil Parameter Persamaan NRTL   | 33 |
| Tabel 4.6 | Hasil Parameter Persamaan UNIQUAC  | 33 |





## DAFTAR GAMBAR

|            |  |    |
|------------|--|----|
| Gambar 2.1 | Kesetimbangan Fase   | 11 |
| Gambar 3.1 | Peralatan Eksperimen   | 17 |
| Gambar 3.2 | Diagram Alir Penelitian  | 21 |
| Gambar 3.3 | Diagram Alir Perhitungan Parameter dengan Persamaan NRTL   | 22 |
| Gambar 3.4 | Diagram Alir Perhitungan Parameter dengan Persamaan UNIQUAC  | 22 |
| Gambar 3.5 | Diagram Alir Perhitungan Komposisi Kesetimbangan   | 23 |
| Gambar 4.1 | LLE Sistem DEC + 1-Propanol + Water pada 303.15 K eksperimen dan literature  | 24 |
| Gambar 4.2 | Korelasi Bachman-Brown Sistem DEC + 1-Propanol + Water pada 303.15 K   | 26 |
| Gambar 4.3 | Korelasi Bachman-Brown ternery system DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert-butanol + Air pada 303,15 K dan 313,15 K   | 26 |
| Gambar 4.4 | Hasil Eksperimen Kesetimbangan Cair-Cair Sistem DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu ( $\Delta$ ) 303.15 K ; ( $\bullet$ ) 313.15 K  | 29 |
| Gambar 4.5 | Hasil Eksperimen Kesetimbangan Cair-Cair Sistem DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada ( $\Delta$ ) 303.15 K ; ( $\bullet$ ) 313.15 K   | 30 |
| Gambar 4.6 | Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Terner DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) Pada Suhu 303.15 K ; ( $\bullet$ ) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ; (—) Persamaan NRTL                             | 30 |
| Gambar 4.7 | Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Terner DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) Pada Suhu 313.15 K ; ( $\bullet$ ) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ; (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan NRTL | 34 |

Gambar 4.8 Diagram Keseimbangan Cair-Cair Sistem Ternern DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 303.15 K ; (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ; (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC

Gambar 4.9 Diagram Keseimbangan Cair-Cair Sistem Ternern DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ; (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ; (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC 35

Gambar 4.10 Diagram Keseimbangan Cair-Cair Sistem Ternern DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 303.15 K ; (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ; (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan NRTL 36

Gambar 4.11 Diagram Keseimbangan Cair-Cair Sistem Ternern DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ; (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ; (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan NRTL 36

Gambar 4.12 Diagram Keseimbangan Cair-Cair Sistem Ternern DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 303.15 K ; (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ; (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC 37

Gambar 4.13 Diagram Keseimbangan Cair-Cair Sistem Ternern DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ; (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ; (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC 37



## DAFTAR NOTASI

|             |   |
|-------------|---|
| $a_{ij}$    | = Parameter aktivitas campuran biner (j/mol)  |
| $f_i$       | = Fugasitas komponen murni i  |
| G, g        | = Energi Gibbs molar  |
| $G^E$       | = Energi Gibbs excess   |
| j           | = Parameter Persamaan UNIQUAC   |
| K           | = Konstanta kesetimbangan   |
| l           | = Parameter Persamaan UNIQUAC   |
| n           | = Jumlah mol  |
| P           | = Tekanan absolut (kPa)   |
| $P_i^{sat}$ | = Tekanan uap jenuh komponen I (kPa)  |
| q           | = Luas permukaan molekular pada persamaan UNIQUAC                                     |
| R           | = Konstanta gas ideal ( $8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ) |
| r           | = Volume molekular pada persamaan UNIQUAC   |
| T           | = Temperatur (K)  |
| $V_i$       | = Volum molar komponen I ( $\text{cm}^3/\text{mol}$ )                                 |
| $x_{ij}$    | = Fraksi mol komponen fase liquida pada kesetimbangan                                 |
| z           | = Fraksi mol <i>overall</i> komponen  |
| RMSD        | = <i>Root Mean Square Deviation</i>   |

## Huruf Greek

|          |   |
|----------|---|
| $\alpha$ | = <i>Non-Randomness Factor</i> , Parameter untuk persamaan NRTL |
| $\beta$  | = Split Fraction  |
| $\gamma$ | = Koefisien aktivitas   |
| $\theta$ | = <i>Area fraction</i>  |
| $\phi$   | = Koefisien fugasitas   |
| $\Sigma$ | = Notasi Penjumlahan  |
| $\tau$   | = Konstanta empiris untuk persamaan NRTL dan UNIQUAC            |

## Superscript

|          |                          |
|----------|--------------------------|
| C        | = <i>Combinatorial</i>   |
| E        | = Ekses                  |
| L        | = <i>Liquida</i>         |
| S        | = <i>Saturated</i>       |
| V        | = Fase uap               |
| R        | = Residual               |
| 0        | = Keadaan standar        |
| -        | = Properti parsial       |
| $\wedge$ | = Properti dalam larutan |

## Subscript

|            |                                 |
|------------|---------------------------------|
| i, j, k, l | = Komponen dalam campuran       |
| e          | = Kondisi kesetimbangan         |
| m          | = Pencampuran ( <i>mixing</i> ) |

## BIODATA PENULIS



**Rizal Wahyu Abdillah** lahir pada tanggal 1 Juli 1992 di kota Sidoarjo-Jawa Timur. Penulis menempuh pendidikan formal di TK Nurur Rohmah Sidoarjo, melanjutkan di MINurur Rohmah Sidoarjo, kemudian menempuh pendidikan menengahnya di SMPN 1 Sidoarjo dan SMAN 2 Sidoarjo. Dan pada tahun 2011, penulis mulai melanjutkan pendidikan S1 di Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS),

Fakultas Teknologi Industri, Program Studi Teknik Kimia, sampai dengan terselesaikannya buku ini. Banyak pengalaman yang penulis dapatkan semasa kuliah, diantaranya penulis aktif dalam organisasi Badan Eksekutif Mahasiswa-FTI (BEM FTI) ITS bidang *Keprofesian dan Keilmiahan*. Selain itu penulis juga menjadi Dewan Perwakilan Mahasiswa FTI-ITS, dan banyak lagi pengalamannya semasa kuliah, namun tidak bisa dituliskan semuanya.

Penulis menjalani kerja praktek di PT BADAK LNG Bontang Kalimantan-Timur. Dan pada akhir studinya, Laboratorium Termodinamika Teknik Kimia dipilih untuk pengerjaan tugas akhir. Penulis menyelesaikan tugas Pra-Desain Pabrik Pembangkit Listrik Tenaga Panas Bumi Kapasitas 130 MW di Kepahiang-Bengkulu dan skripsi yang berjudul “Keseimbangan Cair-Cair Sistem Ternern Dimethyl Carbonate + Isobutanol + Air dan Dimethyl Carbonate + Tert-butanol + Air pada Temperatur 303,15 dan 313,15 K” dibawah bimbingan Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng dan Dr. Ir. Kuswandi, DEA. Apabila ada kritik dan saran yang membangun tentang penelitian ini, maka pembaca dapat menghubungi penulis via email : [rizal.wahyu124@gmail.com](mailto:rizal.wahyu124@gmail.com).





## BIODATA PENULIS



**Abdul Hadi Albar** lahir pada tanggal 30 April 1992 di kota Surabaya-Jawa Timur, merupakan anak ke-3 dari 3 bersaudara. Penulis menempuh pendidikan formal di TK Kurnia Sari Surabaya, melanjutkan di SD Attarbiyah Surabaya, kemudian menempuh pendidikan menengahnya di SMP Negeri 102 Jakarta dan SMA Negeri 28 Jakarta. Dan pada tahun 2011, penulis mulai melanjutkan

pendidikan S1 di Institut Teknologi Sepuluh nopember (ITS), Fakultas Teknologi Industri, Program Studi Teknik Kimia, sampai dengan terselesaikannya buku ini. Banyak pengalaman yang penulis dapatkan semasa kuliah, diantaranya penulis aktif dalam organisasi Himpunan Mahasiswa teknik Kimia (HIMATEKK) ITS dengan jabatan akhir sebagai *Head of Event Management Division* (EMISION) dan banyak lagi pengalamannya semasa kuliah, namun tidak bisa dituliskan semuanya.

Penulis menjalani kerja praktek di PT Badak NGL Bontang. Dan pada akhir studinya, Laboratorium Termodinamika Teknik Kimia dipilih untuk pengerjaan tugas akhir. Penulis menyelesaikan tugas Pra-Desain Pembangkit Listrik Tenaga Panas Bumi 130 MW di Kapahiang-Bengkulu dan skripsi yang berjudul “ Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Ternern Dimethyl Carbonate + Isobutanol + Air dan Dimethyl Carbonate + Tert-Butanol + Air pada Temperatur 303,15 dan 313,15 K” dibawah bimbingan Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng dan Dr.Ir. Kuswandi, DEA Apabila ada kritik dan saran yang membangun tentang penelitian ini, maka pembaca dapat menghubungi penulis via email : [hadialbar28@gmail.com](mailto:hadialbar28@gmail.com).



*(HALAMAN INI SENGAJA DIKOSONGKAN)*



# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Bahan bakar baik bensin maupun solar saat ini banyak digunakan baik untuk aktifitas transportasi maupun industri. Namun, pembakaran yang kurang sempurna menyebabkan penggunaan bahan bakar menjadi lebih boros dan dapat menghasilkan emisi gas buang yang berbahaya bagi kesehatan dan lingkungan. Diantaranya adalah emisi dari materi partikulat, CO, hidrokarbon, NO<sub>x</sub>, dan SO<sub>2</sub> (Kadarohman, 2003).

Alternatif untuk meningkatkan efisiensi pembakaran bahan bakar dan mengurangi pencemaran adalah mereformulasi bahan bakar dengan zat aditif yang berfungsi untuk memperkaya kandungan oksigen dalam bahan bakar. Song (2001) dan Choi (1999) mengemukakan zat aditif *oxygenate* pada bahan bakar berperan untuk meningkatkan bilangan setana (*cetane number*) serta atom oksigen di dalam bahan bakar yang berperan untuk mengoksidasi jelaga dan gas karbon monoksida (CO) sehingga pembakaran menjadi lebih sempurna.

Senyawa *oxygenate* adalah senyawa organik cair yang dapat dicampur ke dalam bahan bakar untuk menambah kandungan oksigennya, seperti *ditertiarybutyl peroxide* (DTBP), *methyl-tertiary-butyl ether* (MTBE), *tri-propylene glycol methyl ether* (TPGME), dan *di-butyl maleate* (DBM). Senyawa organologam yang sudah digunakan sebagai aditif, misalnya *tetra ethyl lead* (TEL) dan *methyl cyclopentadienyl manganese tricarbonyl* (MMT). Aditif ini akan membuat radikal bebas pada rantai karbon bahan bakar. Dengan adanya radikal bebas, maka akan semakin mudah rantai karbon tersebut untuk membuat cabang baru. Efek dari timbulnya cabang baru adalah meningkatnya nilai oktana/setana dan nilai kalori (Adia, 2008). Namun setelah dipakai beberapa waktu, para peneliti menemukan kelemahan TEL yaitu dapat menimbulkan emisi bahan bakar yang

membahayakan bagi kesehatan manusia. Begitu juga dengan MTBE yang memiliki kelarutan tinggi dalam air, sehingga dapat menimbulkan kerugian bagi manusia. Apabila terjadi kebocoran tangki SPBU maka bensin akan meresap ke dalam tana. Air tanah yang terminum manusia ini berbahaya karena telah tercemari oleh MTBE yang bersifat karsinogenik (zat penyebab kanker) (Torre *et al.*, 2006).

Setelah itu dikembangkan beberapa penelitian mengenai alternatif baru zat aditif bahan bakar yang dapat meningkatkan nilai oktan serta memenuhi standar emisi. Baru-baru ini dimethyl carbonate (DMC) banyak digunakan sebagai aditif dalam bahan bakar, disamping kegunaannya sebagai zat elektrolit untuk baterai lithium dan solvent dalam berbagai industry (Hwang *et al.*, 2012). DMC termasuk sebagai *green chemical*, karena bahan ini tidak beracun, ramah lingkungan dan bisa terurai (*biodegradable*) sehingga pemakaian DMC sebagai zat aditif, solvent dan lainnya tidak akan menyebabkan polusi (Torre *et al.*, 2006). Selain itu DMC juga memiliki kandungan oksigen 3 kali MTBE dan mereduksi emisi hidrokarbon dan CO lebih banyak daripada MTBE (Michael *et al.*, 1996).

Wen *et al.* (2009) membuktikan bahwa performa dan hasil emisi dari campuran bensin-DMC dengan DMC sebesar 5% volume lebih baik daripada campuran bensin-ethanol dengan ethanol sebesar 10% volume. Namun, penambahan aditif yang mengandung oksigen meningkatkan konsumsi dari bahan bakar. Hal ini dikarenakan *heating value* dari bahan bakar campuran lebih rendah daripada bensin murni. Menggunakan bahan bakar yang mempunyai *heating value* yang lebih rendah merubah kondisi operasi dari mesin, seperti rasio kompresi, waktu *ignition* dan sebagainya.

Ada beberapa macam proses reaksi pembentukan DMC dalam skala industri antara lain: (1) Reaksi antara phosgene dengan methanol; (2) Reaksi carbon monoxide dengan methanol dan oksigen (*oxidative carbonylation*); (3) Reaksi ethylene oxide dengan CO<sub>2</sub> membentuk ethylene carbonate kemudian diikuti

dengan pertukaran ester dengan methanol; (4) Reaksi langsung antara carbon dioxide dan methanol (Jun-Chul Choi *et al.*, 2008). Pemisahan adalah aspek yang penting dalam proses produksi DMC dalam rangka pemurnian DMC. Misalnya reaksi *oxidative carbonylation* dengan beberapa macam alkohol, memerlukan pemisahan untuk suatu system ternary yaitu DMC-Alkohol-Air (Michael *et al.*, 1996).

Sebagai zat aditif *oxygenate*, DMC digunakan sebagai single-aditif pada bahan bakar maupun co-aditif dengan simple-alkohol. (Hwang *et al.*, 2012). Beberapa alkohol primer dan eter yang memiliki kelarutan rendah dalam air dan beberapa alkylate bisa menjadi calon aditif baru untuk meningkatkan bilangan oktan. Maka perlu dipelajari pengaruh efek perilaku penambahan dari zat aditif tersebut, terutama penambahan DMC co-aditif dengan beberapa simple-alkohol yaitu kelarutannya terhadap air. Namun hingga saat ini ketersediaan data-data kesetimbangan dan kelarutan untuk DMC dengan campuran alkohol masih terbatas.

Penggunaan alkohol dalam penerapan gasohol (gasolin + alkohol) sangat menentukan karakter dari gasohol tersebut. Semakin panjang rantai karbon dari alkohol tersebut akan meningkatkan nilai dari heating value dari sistem campuran tersebut. Pada umumnya penggunaan gasohol masih menggunakan ethanol sebagai jenis alkohol nya. Namun, penggunaan etanol berakibatkan *fuel consumption* yang tinggi pula yang diakibatkan oleh nilai bakar yang tidak cukup tinggi pada etanol. Penggunaan butanol merupakan salah satu cara mendapatkan gasohol dengan *fuel consumption* yang lebih kecil dikarenakan nilai bakar pada butanol yang lebih tinggi.

Butanol memiliki 4 macam isomer yaitu n-butanol, 2-butanol, iso-butanol dan tert-butanol. Dari tabel 1.1 dibawah ini, tert-butanol dan iso-butanol memiliki nilai setana atau oktan yang paling tinggi di antara yang lain sehingga penggunaan kedua komponen tersebut dalam campuran bahan bakar ( gasolin ) dapat menghasil oktan yang lebih baik.



**Tabel 1.1** Nilai RON untuk isomer butanol (Advance Motor Fuels, 2011)

| Komponen     | RON       |
|--------------|-----------|
| n-Butanol    | 94        |
| 2-Butanol    | 101       |
| Tert-Butanol | 104 - 110 |
| Iso-Butanol  | 113       |

Ketersediaan mengenai data kesetimbangan cair-cair (LLE) sangat dibutuhkan untuk memahami perilaku dan sifat termodinamika dari sistem yang mengandung air, alkohol, dan *oxygenates*. Akhir-akhir ini, penelitian mengenai LLE pada sistem terner yang mengandung DMC sudah dipublikasikan seperti kesetimbangan cair-cair sistem terner DMC + C1-C4 Alkohol + Air pada suhu 298.15 K dan tekanan atmosferik. (Hwang *et al.*, 2011). Selain itu juga sudah pernah dilakukan penelitian kesetimbangan cair-cair sistem terner Air + 1-butanol + DMC/DEC pada suhu 298.15 K. (Chen *et al.*, 2011). Namun untuk penelitian pada suhu 298.15 K sulit diaplikasikan di Indonesia, karena Indonesia berada pada iklim tropis, dimana suhu rata-ratanya berkisar 303.15 K – 313.15 K pada saat musim panas.

Karena suhu mempengaruhi pada daerah kesetimbangan cair-cair, maka penelitian kali ini berfokus suhu yang perilaku kesetimbangan fasa cair-cair untuk sistem dimetil karbonat + Isobutanol + air dan dimetil karbonat + Tert-butanol + air pada temperatur 303.15 K dan 313.15 K. Diharapkan dengan adanya data kesetimbangan ini dapat menjadi dasar pencampuran untuk bahan bakar yang mempunyai performa yang bagus.

## 1.2 Perumusan Masalah

Akhir-akhir ini, penelitian mengenai LLE pada sistem terner yang mengandung DMC dan alkohol sudah dipublikasikan seperti kesetimbangan cair-cair sistem terner DMC + C1-C4

Alkohol + Air pada suhu 298.15 K dan tekanan atmosferik. (Hwang *et al.*, 2011). Selain itu juga sudah pernah dilakukan penelitian kesetimbangan cair-cair sistem terner air + 1-butanol + DMC/DEC pada suhu 298.15 K. (Chen *et al.*, 2011). Karena Indonesia berada pada iklim tropis, dimana suhu rata-ratanya berkisar 303.15 K – 313.15 K maka dibutuhkan data kesetimbangan pada suhu di atas 298.15 K.

Di sisi lain methanol dan etanol bersifat korosif sehingga pemakaiannya mulai dikurangi, maka dicobalah butanol sebagai energi alternatif untuk menggantikan etanol sebagai blending dengan DMC. Nilai oktan untuk butanol (103) mirip dengan bensin (90-105) tetapi lebih rendah dari etanol (108,7) maupun metanol (108,6). Butanol sendiri memiliki beberapa keuntungan, yaitu *vapor pressure* yang lebih rendah (1,3 kPa) dibandingkan metanol (12 kPa), etanol (8 kPa) maupun propanol (2 kPa) pada suhu 20°C, dan juga lebih ramah terhadap mesin karena tidak bersifat korosif seperti etanol dan metanol. Kelebihan lain dari butanol adalah bahan baku sintesa butanol yang berasal dari biomassa. Hal ini merupakan peluang butanol untuk dikembangkan dan diproduksi secara massal karena Indonesia kaya akan biomassa.

Berdasarkan uraian di atas, penelitian mengenai kesetimbangan cair-cair sistem terner DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert-butanol + Air pada temperatur 303.15 K dan 313.15 K perlu dilakukan. Diharapkan dengan adanya data kesetimbangan ini dapat menjadi dasar pencampuran untuk bahan bakar yang mempunyai performa yang bagus.

### **1.3 Tujuan Penelitian**

Tujuan dari penelitian ini adalah :

1. Memperoleh data kesetimbangan cair-cair (LLE) sistem terner DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert-butanol + Air pada suhu 303.15 K dan 313.15 K pada tekanan atmosferik.

2. Mengkorelasikan data eksperimen yang didapatkan dengan menggunakan persamaan NRTL dan UNIQUAC.

#### **1.4 Manfaat Penelitian**

Manfaat yang dapat diperoleh dari penelitian ini adalah memperoleh data kesetimbangan cair-cair sistem ternar DMC + Isobutanol + air dan DMC + Tert- butanol + air pada temperatur 303.15 K dan 315.15 K. Data kesetimbangan cair-cair yang didapatkan dari penelitian ini sangat bermanfaat dalam pengembangan bahan bakar alternatif di Indonesia.



## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1 Tinjauan Penelitian

Berikut ini adalah penelitian yang telah dilakukan dengan tema kesetimbangan cair-cair yang berkaitan dengan DMC, baik secara eksperimen maupun simulasi :

Hwang, *et al.* (2011) melakukan eksperimen untuk memprediksi data kesetimbangan cair-cair system terner dari campuran dimethyl carbonate, diphenyl carbonate, phenol dan air pada suhu 358,15 K dan tekanan atmosfer menggunakan stirrer dan thermo-regulated cells : DMC + DPC + air, DMC + phenol + air dan DPC+phenol+air. Parameter data kesetimbangan yang digunakan, dikorelasikan dengan model persamaan UNIQUAC dan NRTL. Sebagai tambahan, korelasi Bachman-Brown digunakan untuk memastikan keakuratan data eksperimen dari tiap system. Untuk menganalisa digunakan GC yang dilengkapi dengan HP-5 (30 m x 0,32 mm x 0,25  $\mu$ m) kolom kapiler dan thermal conductivity detector. Suhu detector adalah 493,15 K dan suhu oven 323,15 K selama 3 menit hingga 473,15 K. Sebagai carier gas digunakan gas helium dengan flow rate 2,0 ml.s<sup>-1</sup> dalam kolom. Estimasi fraksi mol kurang dari  $1 \times 10^{-4}$ .

Hwang, *et al.* (2008) melakukan eksperimen untuk memprediksi kesetimbangan cair-cair untuk sistem biner pada *di-isopropyl ether* (DIPE) dan air antara temperatur 288,15 dan 323,15 K dan untuk sistem terner dengan C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> alkohol pada temperatur 298, 15 K. Parameter kesetimbangan yang digunakan yaitu model persamaan UNIQUAC dan NRTL.

Park, *et al.* (2012) melakukan eksperimen untuk memprediksi kesetimbangan cair-cair pada suhu 298,15 K dan tekanan atmosfer untuk sistem ternary pada DMC + C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> Alkohol + Air menggunakan stirrer dan *thermo-regulated cells* : DMC+methanol+air, DMC+etanol+air, DMC+1-propanol+air, DMC+2-propanol, DMC+1-butanol+air, DMC+2-butanol+air. Parameter yang digunakan untuk LLE data system terner adalah

model persamaan UNIQUAC (UNiversal QUAsi Chemical) dan NRTL. Sebagai tambahan, korelasi Bachman-Brown digunakan untuk memastikan keakuratan data eksperimen dari tiap system. Untuk menganalisa digunakan *Gas Chromatography* yang dilengkapi dengan HP-FFAP (polietilen glycol 25 m x 0,2 mm x 0,3  $\mu\text{m}$ ) kolom kapiler dan thermal conductivity detector. Suhu detector adalah 473,15 K dan suhu oven 343,15 K selama 7 menit. Sebagai carier gas digunakan gas helium dengan flow rate 2,0  $\text{ml.s}^{-1}$  dalam kolom. Estimasi fraksi mol adalah kurang dari  $1 \times 10^{-4}$ .

(Torre, *et al.* 2010) melakukan eskperimen untuk memprediksi data kesetimbangan cair-cair sistem terner dari dimethyl carbonate-methanol-air pada suhu yang berbeda yaitu, 283,15 sampai 333,15 K. Parameter data kesetimbangan yang digunakan, dikorelasikan dengan model persamaan UNIQUAC. Kemudian data VLE dari system DMC+air pada tekanan 101,3 kPa diprediksi menggunakan model UNIQUAC dan parameter yang diperoleh dari data LLE. Hasil yang diperoleh dianalisa menggunakan *Gas Chromatography* yang dilengkapi dengan TCD. Pemisahan 3 komponen ini menggunakan 2m x 1m/8in packed column dengan Porapack Q-S 80/100 dan akurasi fraksi molnya adalah 0,001.

Jeong, *et al.* (2014) melakukan eksperimen untuk memprediksi kesetimbangan fasa dan sifat campuran untuk pemisahan reaksi intermediat yang dihasilkan selama sintesis non-phosgen diphenylcarbonate (DPC). Intermediat didasarkan pada dimetil karbonat (DMC), fenol, metanol dan anisol, dll. Secara analitis akan ditentukan kesetimbangan cair-cair (LLE) system terner untuk campuran berikut pada tekanan atmosfer dan suhu konstan: (air + DMC + anisol) pada 313,15 K ; (air + metanol + anisol) pada 308,15 K dan (air + metanol + fenol) pada 328,15 K. Selain itu, densitas, indeks bias, volume molar berlebih ( $V^E$ ) dan penyimpangan dalam molar refractivity ( $\Delta R$ ) konstituen sistem biner pada 298,15 K ditentukan. Data LLE eksperimen berkorelasi dengan excess Gibbs free model energy: Non Random

Two-Liquid (NRTL) dan Universal QUAsiChemical (UNIQUAC). Data  $V^E$  dan  $\Delta R$  yang berkorelasi dengan Redlich-Kister polynomial.

## 2.2. Isobutanol

Dalam industri kimia, isobutanol merupakan pelarut penting dan bahan baku untuk sintesis produk-produk lainnya. Juga digunakan sebagai pelarut cat dan bahan pencampur tinta, dan baru-baru ini sebagai bahan bakar alternatif seperti gasoline.

**Tabel 2.1** Properti Isobutanol (Lewis, 1997)

|                      |                                    |
|----------------------|------------------------------------|
| <b>Berat molekul</b> | 74,112 gr/gmol                     |
| <b>Rumus molekul</b> | $C_4H_{10}O$                       |
| <b>Titik didih</b>   | 226,2 °F (107,89 °C) pada 760 mmHg |
| <b>Densitas</b>      | 0.802 g/ml pada 25 °C              |

## 2.3. Tert-butanol

Tert-butanol digunakan sebagai pelarut dalam industri dan bahan penghilang cat. Kemudian tert-butanol banyak di aplikasikan sebagai oktan booster pada gasoline yang dapat meningkatkan nilai oktan pada gasoline. Selain itu tert-butanol merupakan intermediate chemical yang digunakan untuk memproduksi MTBE.

**Tabel 2.2** Properti Tert-Butanol (Lewis, 1997)

|                      |                           |
|----------------------|---------------------------|
| <b>Berat molekul</b> | 74,112 gr/gmol            |
| <b>Rumus molekul</b> | $C_4H_{10}O$              |
| <b>Titik leleh</b>   | 26 °C                     |
| <b>Titik didih</b>   | 83 °C                     |
| <b>Densitas</b>      | 0,775 g/ml pada suhu 25°C |



#### 2.4. Dimethyl Carbonate (DMC)

DMC bisa diproduksi dengan mereaksikan carbon monoksida, methanol dan air. Karena diklasifikasikan sebagai "*green solvent*", dimetil karbonat telah berkembang dalam popularitas dan diaplikasikan sebagai pengganti toluene, xylene, ethyl acetate, butyl acetate, acetone or butanone untuk memproduksi environmental coating, perekat dan tinta percetakan. DMC juga bisa digunakan sebagai tambahan bahan bakar karena memiliki kandungan oksigen yang tinggi.

**Tabel 2.3** Properti Dimethyl Carbonate ( Lewis, 1997)

|                      |                                    |
|----------------------|------------------------------------|
| <b>Berat molekul</b> | 90,08 gr/gmol                      |
| <b>Rumus molekul</b> | $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{CO}$ |
| <b>Titik leleh</b>   | 4 °C                               |
| <b>Titik didih</b>   | 90 °C                              |
| <b>Densitas</b>      | 1,073 g/ml pada 25°C               |
| <b>Kelarutan</b>     | 139 g/L pada 25°C (dalam air)      |

#### 2.5. Kesetimbangan Cair-Cair (LLE)

Sejumlah proses pemisahan yang penting dalam industri seperti absorpsi, ekstraksi, dan distilasi merupakan proses kontak dua fase. Bila fase-fase tersebut tidak berada dalam kesetimbangan maka akan terjadi transfer massa antar fase. Laju transfer masing-masing komponen tergantung dari *driving force*, dalam hal ini adalah besarnya penyimpangan sistem dari suatu kesetimbangan. Dengan demikian penentuan laju transfer massa memerlukan data kesetimbangan dari sistem tersebut. Kesetimbangan merupakan kondisi statis di mana secara makroskopis tidak ada perubahan *property* sistem terhadap waktu.

Kesetimbangan termodinamika merupakan terdistribusinya komponen dalam semua fase pada harga potensial kimia ( $\mu$ ) tertentu sehingga terjadi kesamaan potensial kimia masing-masing komponen dalam semua fase yang berada dalam kesetimbangan. Untuk sistem yang membentuk dua fase,



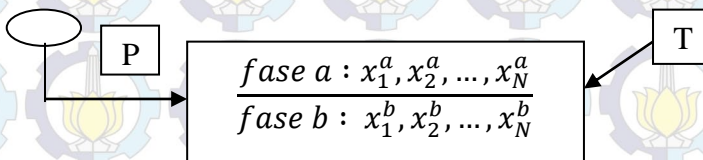
misalkan fase a dan fase b, maka harus memenuhi 3 kriteria kesetimbangan termodinamika, yaitu:

1. Kriteria I :  $T^a = T^b$  (2.1)

2. Kriteria II :  $P^a = P^b$  (2.2)

3. Kriteria III :  $\mu^a = \mu^b, i = 1, 2, 3, \dots$  (2.3)

Berikut ini ditinjau sistem tertutup yang terdiri dari dua fase dalam kesetimbangan. Di dalam sistem tertutup ini, tiap fase merupakan sistem terbuka satu sama lain yang bebas untuk memindahkan massa antar fase.



**Gambar 2.1.** Kesetimbangan Fase

Akan tetapi tidak semua sistem memiliki kesamaan potensial kimia pada temperatur dan tekanan tertentu pada kondisi kesetimbangan yang sebenarnya. Kriteria III atau yang disebut juga kriteria isoaktivasi, hanya merupakan syarat perlu (*necessary condition*) dan bukan syarat cukup (*sufficient condition*) bagi kesetimbangan mengingat bahwa kesamaan potensial tidak selalu terjadi pada kondisi kesetimbangan. Kondisi kesetimbangan yang sebenarnya terjadi jika dan hanya jika energi Gibbs pencampuran (*Gibbs energy of mixing*),  $\Delta_m G$  atau  $\Delta G$  memiliki nilai minimum.

Kriteria potensial kimia dapat dituliskan dalam bentuk fugasitas maupun aktivitas, dimana aktivitas fase cair di fase a (disebut fase ekstrak) sama dengan aktivitas fase cair di fase b (disebut fase rafinat).

$$\hat{f}_i^a = \hat{f}_i^b \quad (2.4)$$

$$(\gamma_i x_i)^a = (\gamma_i x_i)^b \quad (2.5)$$

Perhitungan kesetimbangan fase pada dasarnya bertujuan untuk menentukan komposisi setiap komponen dalam fase-fase kesetimbangan. Seperti yang telah dinyatakan di atas, pada

kondisi kesetimbangan harga  $\Delta G$  sistem mencapai minimum. Dalam perhitungan, kondisi  $\Delta G$  lebih mudah dinyatakan dalam bentuk tak berdimensi,  $(\Delta G/RT)$  karena bisa dihubungkan langsung dengan besaran tak berdimensi energi gibbs eks,  $(G^E/RT)$  menurut hubungan:

$$\left(\frac{\Delta G}{RT}\right) = \left(\frac{G^E}{RT}\right) + \sum x_i \ln x_i \quad (2.6)$$

Suku  $(\Delta G/RT)$  memiliki hubungan secara langsung dengan temperatur, komposisi, dan koefisien aktivitas. Ekspresi yang menghubungkan  $(\Delta G/RT)$  dengan komposisi kesetimbangan khususnya LLE dapat dirumuskan dalam berbagai model persamaan antara lain NRTL dan UNIQUAC, yang masing-masing mempunyai parameter sendiri. Kedua model persamaan tersebut dapat diaplikasikan untuk sistem biner, terner, atau yang lebih tinggi.

$$\begin{aligned} (\gamma_1 x_1)^a &= (\gamma_1 x_1)^b (\gamma_2 x_2)^a \\ &= (\gamma_2 x_2)^b (\gamma_3 x_3)^a = (\gamma_3 x_3)^b \end{aligned} \quad (2.7)$$

Kesetimbangan cair-cair (LLE) jauh lebih peka terhadap perubahan kecil koefisien aktivitas daripada kesetimbangan uap-cair (VLE) karena pada kesetimbangan cair-cair, koefisien aktivitas dominan. Ketidaktekelitian kecil pada koefisien aktivitas akan menimbulkan kesalahan besar. Pengaruh perubahan temperatur dalam rentang kecil pada LLE dapat diabaikan. Sedangkan pada VLE, pengaruh temperatur sangat besar. Faktor tekanan memiliki pengaruh yang sangat kecil pada LLE dalam kondisi moderat.

## 2.6. Korelasi Koefisien Aktifitas Fase Cair

### 2.6.1. Persamaan NRTL (Non Random Two Liquid)

Persamaan NRTL dikemukakan oleh Renon dan Prauznitz (1968). Persamaan ini diturunkan berdasarkan konsep *local composition* yang dipelopori oleh Wilson. Persamaan NRTL ini dapat digunakan untuk sistem yang larut sebagian maupun untuk sistem yang larut sempurna. Persamaan ini dapat dipakai secara luas dalam VLE, LLE, dan VLLE untuk berbagai jenis zat, misalnya campuran hidrokarbon jenuh dan spesies polar,

campuran senyawa non-polar, campuran spesies non-polar dan polar, campuran air dan spesies polar, dan campuran alkohol dengan campuran spesies non-polar. Untuk sistem non-ideal yang moderat (penyimpangannya sedang), persamaan ini tidak lebih baik dari persamaan Van Laar dan persamaan Margules. Tetapi untuk campuran non-ideal atau untuk larutan yang larut sebagian, persamaan ini dapat diwakili dengan data eksperimen secara cukup baik. Persamaan tersebut dinyatakan untuk sistem multikomponen sebagai berikut :

$$\left(\frac{G^E}{RT}\right) = \sum_i x_i \frac{\sum_j \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_k G_{ki} x_k} \quad i, j, k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.8)$$

$$\tau_{ji} = \frac{g_{ji} - g_{ii}}{RT} \quad (2.9)$$

$$G_{ji} = \exp(-\alpha_{ji} \tau_{ji}) \quad (2.10)$$

$$\alpha_{ji} = \alpha_{ij} \quad (2.11)$$

$$g_{ji} = g_{ij} \quad (2.12)$$

Koefisien aktifitas untuk sembarang komponen  $i$  dinyatakan sebagai berikut:

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^n \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{k=1}^n G_{ki} x_k} + \sum_{j=1}^n \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{k=1}^n G_{kj} x_k} \left( \tau_{ij} - \sum_{k=1}^n \frac{x_k \tau_{kj} G_{kj}}{\sum_{k=1}^n G_{kj} x_k} \right) \quad (2.13)$$

Keuntungan menggunakan Persamaan NRTL :

Pengalaman menunjukan bahwa Persamaan model NRTL ini memiliki keandalan yang konsisten dibanding Van Laar dan Margules dalam arti persamaan ini biasanya dapat menangani keadaan-keadaan yang sangat tidak ideal, hanya dengan dua atau tiga parameter yang dapat disesuaikan. Dan Persamaan NRTL sesuai untuk sistem multikomponen.



## 2.6.2 Model Persamaan UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical)

Persamaan UNIQUAC dikemukakan oleh Abrams dan Prausnitz (1975). Persamaan UNIQUAC dapat diaplikasikan untuk campuran liquid non-elektrolit yang mengandung fluida polar atau non-polar seperti hidrokarbon, alkohol, nitril, keton, aldehid, asam organik dan air termasuk campuran larut sebagian. Persamaan tersebut dipisahkan menjadi dua bagian yaitu bagian kombinatorial yang terdiri dari parameter komponen murni saja untuk menghitung perbedaan bentuk dan ukuran molekul, serta bagian residual yang menggabungkan dua parameter biner tiap pasang molekul untuk menghitung interaksi molekul.

$$g = g^c + g^R \quad (2.14)$$

Untuk sistem multikomponen :

$$g^c = \sum_i x_i \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} \sum_i q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} \quad (2.15)$$

$$g^R = - \sum_i q_i x_i \ln \left( \sum_j \theta_j \tau_{ji} \right) \quad i, j, k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.16)$$

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad \Phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (2.17) \quad (2.18)$$

$$\tau_{ji} = \exp \left( - \frac{(u_{ji} - u_{ii})}{RT} \right) \quad \text{dimana} \quad u_{ii} = u_{jj} = u_{kk} = 0 \quad (2.19)$$

$$u_{ji} = u_{ij} \quad (2.20)$$

Koefisien aktivitas untuk sembarang komponen i dinyatakan sebagai berikut:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^R \quad (2.21)$$

$$\ln \gamma_i^c = \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (2.22)$$



$$\ln \gamma_1^R = q_i \left( 1 - \ln s_i - \sum_j \theta_j \frac{\tau_{ij}}{s_j} \right) \quad (2.23)$$

$$J_i = \frac{r_i}{\sum_j r_j x_j} \quad (2.24)$$

$$L_i = \frac{q_i}{\sum_j q_j x_j} \quad (2.25)$$

$$s_i = \sum_l \theta_l \tau_{li} \quad (2.26)$$

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (2.27)$$

Model UNIQUAC dapat diterapkan untuk memprediksi kesetimbangan uap-cair sistem multi komponen dengan parameter energi interaksi sistem biner. Keuntungan menggunakan persamaan UNIQUAC adalah :

- Hanya mempunyai dua parameter yang dapat disesuaikan.
- Mempunyai ketergantungan yang lebih kecil terhadap suhu.
- Dapat diterapkan pada larutan dengan molekul-molekul yang besar atau kecil sebab variabel konsentrasi primer merupakan fraksi permukaan dan bukan fraksi mol.

## 2.7 Perhitungan Deviasi Hasil Eksperimen dan Prediksi

Untuk mengetahui deviasi antara hasil eksperimen dengan hasil prediksi digunakan metode *Root Mean Square Deviation* (RMSD). Perhitungan %RMSD menggunakan persamaan berikut:

$$\%RMSD = 100\% x \sqrt{\frac{\sum_k \sum_j \sum_i (x_{ijk}^{eksperimen} - x_{ijk}^{prediksi})^2}{6n}} \quad (2.28)$$

Dimana:

k = tie line = 1, 2, 3, ... ,n

i = komponen

j = fase (ekstrak atau rafinat)

OF = *objective function*

Berdasarkan persamaan di atas maka akan didapatkan %RMSD berdasarkan model paramater NRTL dan UNIQUAC.

## 2.8 Korelasi Bachman-Brown

Korelasi Bachman-Brown digunakan untuk memastikan reliabilitas dari data eksperimen. Korelasi ini menghasilkan regresi R-Squared (RSQ) yang memberikan gambaran dari data eksperimen dengan plot data  $x_1^I/x_3^{II}$  vs  $x_1^I$ ,

$$\frac{x_1^I}{x_3^{II}} = AX_1^I + B$$

Dimana A dan B adalah Bachman-Brown sedangkan parameter  $x_1^I$  adalah fraksi mol dari DMC di fase organik dan  $x_3^{II}$  adalah mol fraksi air di fase aqueous.

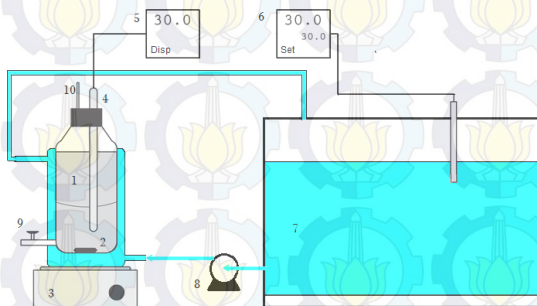
### BAB III

## METODOLOGI PENELITIAN

Penelitian ini dilakukan dengan eksperimen untuk mendapatkan data kesetimbangan cair-cair dalam fase organik dan fase *aqueous*. Selanjutnya fase organik dan fase *aqueous* hasil eksperimen tersebut dianalisa dengan menggunakan *Gas Chromatography* (GC) untuk mengetahui komposisi kesetimbangan fase. Langkah selanjutnya adalah memprediksi kesetimbangan berdasarkan korelasi model persamaan NRTL dan UNIQUAC.

#### 3.1. Peralatan Eksperimen

Percobaan ini menggunakan *equilibrium cell* yang dilengkapi dengan jaket pemanas untuk menjaga suhu agar tetap konstan serta magnetik stirer untuk membuat larutan teraduk sempurna. Pada Gambar 3.1 menunjukkan bahwa *equilibrium cell* yang terangkai yang dilengkapi dengan *PID controller* dan *RTD Pt100* untuk mengatur suhu air sirkulasi.



**Gambar 3.1** Peralatan Eksperimen

Keterangan Gambar :

- |                               |                               |
|-------------------------------|-------------------------------|
| 1. <i>Equilibrium cell</i>    | 6. <i>Temperature setting</i> |
| 2. <i>Stirrer</i>             | 7. <i>Waterbath</i>           |
| 3. <i>Magnetic stirrer</i>    | 8. Pompa                      |
| 4. <i>RTD Pt100</i>           | 9. <i>Sampling port</i>       |
| 5. <i>Temperature display</i> | 10. Pipa kapiler              |

Sedangkan untuk analisa digunakan peralatan neraca analitik OHAUS tipe AP210, microliter syringe Shimadzu, dan Shimadzu GC 2010 Plus dengan TCD Detector.

Rincian mengenai peralatan eksperimen adalah sebagai berikut:

1. Equilibrium cell dengan volume maksimal 50 mL.
2. Ketidakpastian dan akurasi pengukuran dari alat *Autonics RTD Pt100* dan *PID Controller ANLY AT-502* adalah  $0.05\text{ }^{\circ}\text{C}$  dan  $\pm 1.4\text{ }^{\circ}\text{C}$ .
3. Ketidakpastian dan akurasi pengukuran dari neraca analitik OHAUS tipe AP210 adalah  $\pm 0.1\text{ mg}$ .
4. Kapasitas maksimum dan ketidakpastian pengukuran dari microliter syringe Shimadzu adalah  $10\text{ }\mu\text{L}$  dan  $\pm 0.1\text{ }\mu\text{L}$ .
5. Standar deviasi Shimadzu GC 2010 Plus adalah  $0.9\text{ }\%$  area.

### 3.2. Bahan Yang Digunakan

Bahan-bahan yang digunakan pada percobaan ini adalah *Dimethyl Carbonate* yang diperoleh dari Wuhan Fortuna Chemical Co., LTD, China, dengan kemurnian 99%, Isobutanol p.a (MERCK) dengan kemurnian 99.9%, *Tert Butanol* p.a (MERCK) dengan kemurnian 99%, dan Aquabidesilata.

### 3.3. Scope Penelitian

Pada penelitian ini dilakukan pengukuran kesetimbangan cair-cair untuk sistem DMC – Isoutanol - Air dan DMC – Tert-butanol - Air pada suhu 303,15 dan 313,15 K pada tekanan atmosfer.



### 3.4. Prosedur Eksperimen

#### 3.4.1. Eksperimen

Tahap percobaan dilakukan untuk memperoleh data kesetimbangan fase. Percobaan dilakukan dengan cara mencampurkan bahan yang telah diketahui komposisinya ke dalam *equilibrium cell*. Peralatan ini dilengkapi dengan *magnetic stirrer* dan jaket untuk sirkulasi air sebagai pemanas sesuai suhu yang dikehendaki. Campuran kemudian diaduk pada suhu 303.15 dan 313.15 K pada tekanan atmosferik selama 4 jam. Setelah 4 jam pengadukan dihentikan, kemudian campuran dibiarkan sampai mencapai kesetimbangan selama 20 jam. Setelah kesetimbangan tercapai pada masing-masing fase diambil sampel untuk dianalisa komposisinya memakai *Gas Chromatography* (GC) Shimadzu 2010 Plus menggunakan kolom Stabilwax untuk analisa sistem DMC – Isobutanol – Air dan kolom Rtx-5 untuk analisa sistem DMC – Tert-butanol – Air.

#### 3.4.2. Analisa

Analisa komposisi sistem terner DMC – Isobutanol – Air dan DMC – Tertbutanol – Air dianalisa menggunakan *Gas Chromatography*. Metode yang pertama untuk sistem terner DMC – Isobutanol – Air menggunakan *carrier gas* helium dengan laju alir gas 2 mL/menit, *purge flow* 3 mL/menit, *column flow* 0.4 mL/menit dan split ratio 60:1. Selain itu, suhu injector dan suhu detector yang digunakan adalah 190 °C, kemudian suhu kolom dijaga pada suhu 70 °C dengan waktu analisa tiap sampel adalah 5 menit. Metode yang kedua untuk sistem DMC – Tert-butanol – Air menggunakan *carrier gas* helium dengan laju alir gas 2 mL/menit, *purge flow* 3 mL/menit, *column flow* 0.4 mL/menit dan split ratio 60:1. Selain itu, suhu injector dan suhu detector yang digunakan adalah 250 °C, kemudian suhu kolom dijaga pada suhu 70 °C dengan waktu analisa tiap sampel adalah 7.5 menit. Setelah kondisi analisa GC tersebut tercapai, sampel

sebesar 1 microliter diinjeksikan ke dalam kolom. Hasil kuantitatif sampel dideteksi menggunakan detector jenis TCD (*Thermal conductivity Detector*). *Detector* jenis TCD ini untuk mendeteksi senyawa-senyawa berdasarkan perbedaan penghantar panas. Hasil yang didapatkan berupa grafik yang dapat diketahui retention time dan fraksi area masing-masing zat.

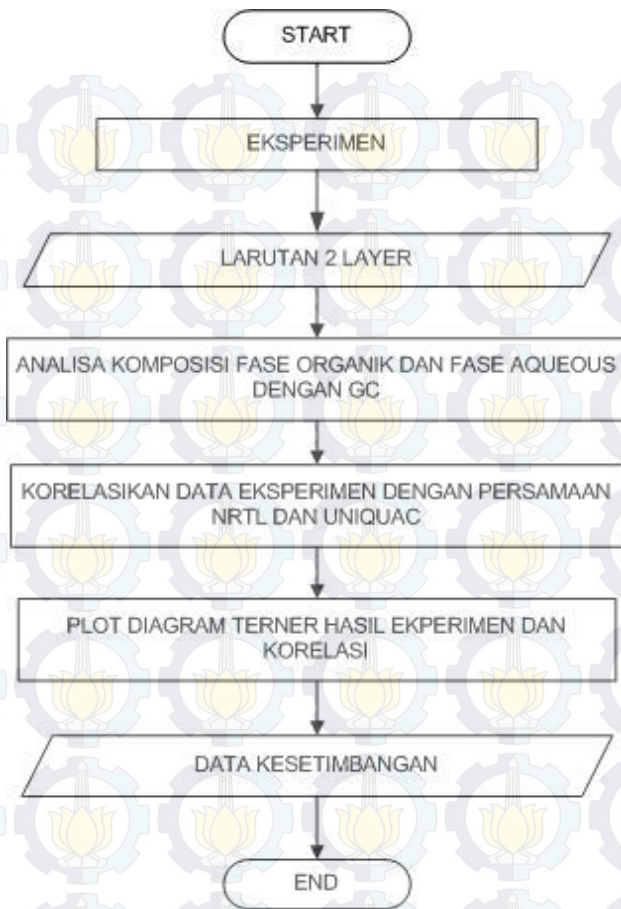
### **3.5. Diagram Alir Metodologi Penelitian**

#### **3.5.1 Diagram Alir Metode Penelitian**

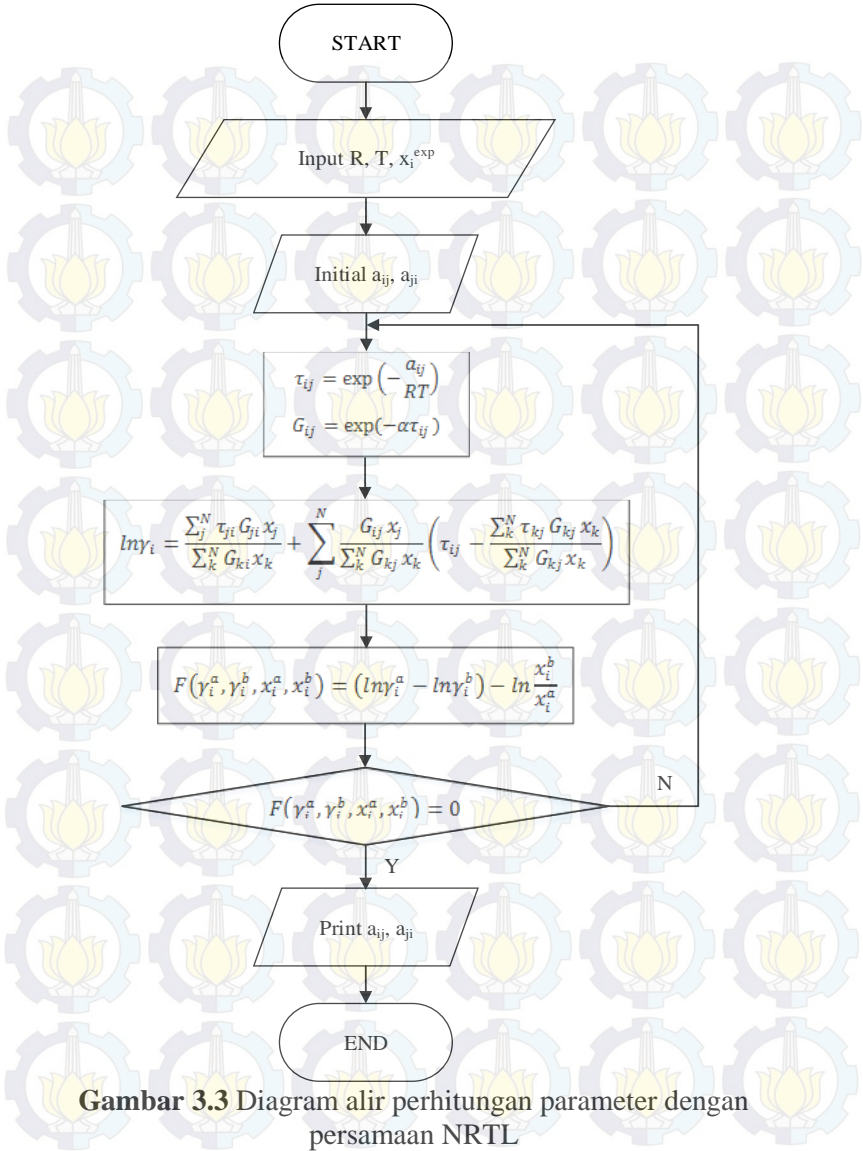
Diagram Alir penelitian disajikan pada Gambar 3.2.

#### **3.5.2 Diagram Blok Perhitungan Koefisien Aktifitas dan fitting parameter**

Untuk menghitung koefisien aktifitas kesetimbangan cair-cair sistem ternier DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert butanol + Air ini digunakan persamaan UNIQUAC dan NRTL. Berikut ini adalah langkah-langkah untuk menghitung koefisien aktifitas dengan menggunakan persamaan NRTL.

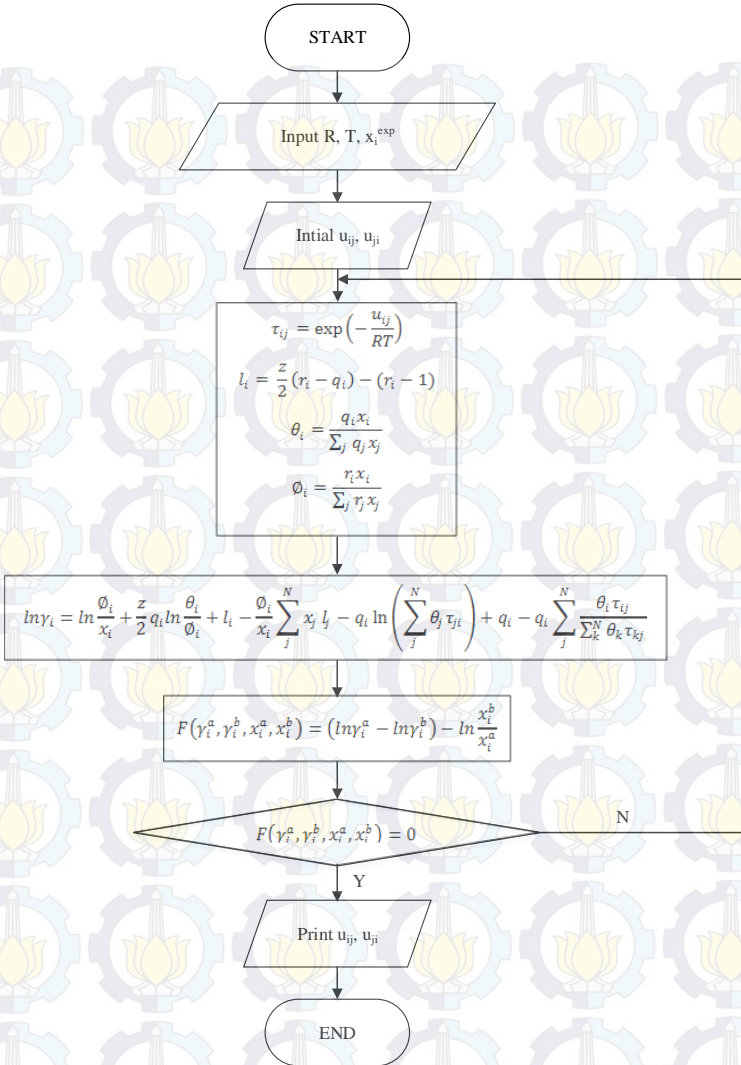


**Gambar 3.2** Diagram Alir Penelitian



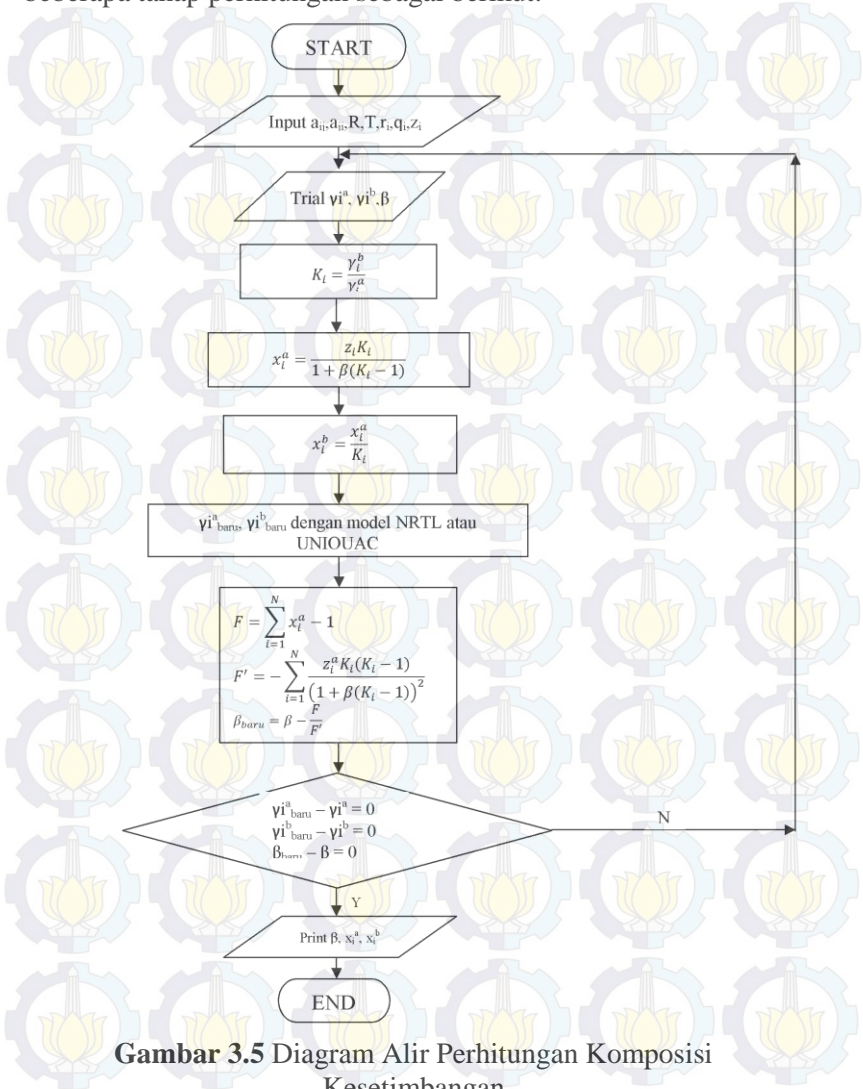
**Gambar 3.3** Diagram alir perhitungan parameter dengan persamaan NRTL





**Gambar 3.4** Diagram alir perhitungan parameter dengan persamaan UNIQUAC

Dalam penentuan komposisi komponen, dilakukan beberapa tahap perhitungan sebagai berikut.



## BAB IV HASIL & PEMBAHASAN

### 4.1 Hasil dan Pembahasan Eksperimen

Pada penelitian ini dilakukan pengukuran kesetimbangan fase cair-cair sistem Dimethyl Carbonate + Isobutanol + Air dan sistem Dimethyl Carbonate + Tert-Butanol + Air pada suhu 303,15 dan 313,15 K dengan tekanan atmosferik. Data penelitian ini kemudian dikorelasikan menggunakan persamaan UNIQUAC dan NRTL. Kedua persamaan ini dipilih karena dapat diterapkan pada kesetimbangan cair-cair (LLE) sistem biner maupun multikomponen pada berbagai jenis campuran. Hasil persamaan korelasi kedua model diatas diharapkan dapat digunakan untuk interpolasi dan ekstrapolasi kesetimbangan fase sistem tersebut.

Dalam penelitian ini, dilakukan validasi alat dalam percobaan dengan membandingkan hasil eksperimen penelitian sebelumnya yang telah dilakukan oleh Zeng *et al*, (2013) dimana diagram terner validasi ini dapat dilihat melalui Gambar 4.1. Berdasarkan hasil validasi dapat dilihat bahwa data eksperimen telah sesuai dengan data eksperimen Zeng *et al*, (2013). Selain itu untuk mengetahui realibilitas data maka data eksperimen ini dan data eksperimen Zeng *et al*, (2013) dikorelasikan dengan Korelasi Bachman-Brown. Korelasi ini didasarkan pada konsistensi persebaran data baik di fase organic maupun di fase aqueous di setiap titik sesuai dengan persamaan :

$$\frac{X_1^I}{X_3^{II}} = AX_1^I + B$$

Dimana,

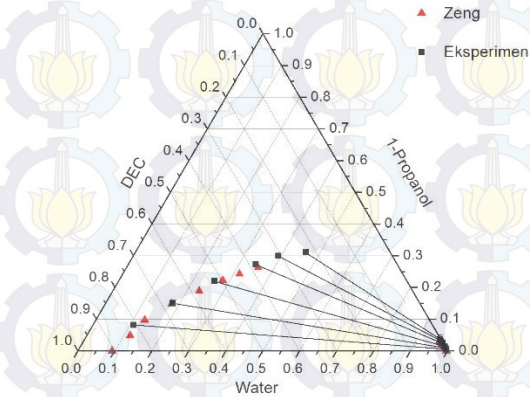
$X_1^I$  = Fraksi DEC di fase organic

$X_3^{II}$  = Fraksi DEC di fase aqueous

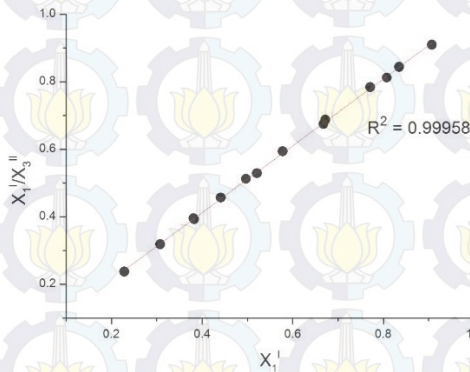
A = Gradient

B = Intersept

Dari Gambar 4.2 dapat disimpulkan bahwa data eksperimen sudah *reliable*. Ini dapat disimpulkan dari nilai regresi yang mendekati angka 1 (0,9995). Sehingga alat yang digunakan dalam penelitian ini telah tervalidasi dan siap untuk digunakan.



Gambar 4.1



Gambar 4.2 Korelasi Bachman-Brown Sistem DEC + 1-Propanol + Water pada 303.15 K



Pada eksperimen kesetimbangan cair-cair sistem Dimethyl Carbonate (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3) pada suhu 303,15 dan 313,15 K terdistribusi menjadi dua fase (fase atas dan bawah). Komposisi data kesetimbangan sistem ini diperoleh dari hasil analisa dengan menggunakan *Gas Chromotoghrapy* (GC). Adapun data kesetimbangan cair-cair hasil eksperimen yang diperoleh untuk sistem Dimethyl Carbonate (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3) untuk suhu 303,15 dan 313,15 K ditunjukkan oleh Tabel 4.1. Sedangkan untuk sistem Dimethyl Carbonate (1) + Tert-Butanol (2) + Air (3) pada suhu 303,15 dan 313,15 K dapat dilihat pada tabel 4.2.

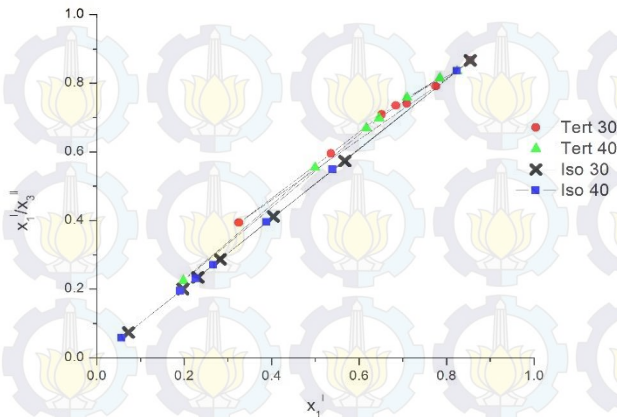
**Tabel 4.1** Data eksperimen kesetimbangan cair-cair sistem Dimethyl Carbonate (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3)

| T(K)   | Fase Organik   |                |                | Fase Aqueous   |                |                |
|--------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
|        | X <sub>1</sub> | X <sub>2</sub> | X <sub>3</sub> | X <sub>1</sub> | X <sub>2</sub> | X <sub>3</sub> |
| 303.15 | 0,0000         | 0,5428         | 0,4573         | 0,0000         | 0,0126         | 0,9874         |
|        | 0,1969         | 0,3039         | 0,4993         | 0,0093         | 0,0081         | 0,9826         |
|        | 0,2311         | 0,2832         | 0,4857         | 0,0082         | 0,0071         | 0,9848         |
|        | 0,2827         | 0,2433         | 0,4740         | 0,0078         | 0,0061         | 0,9861         |
|        | 0,4041         | 0,1871         | 0,4089         | 0,0120         | 0,0057         | 0,9823         |
|        | 0,5673         | 0,1389         | 0,2938         | 0,0067         | 0,0038         | 0,9894         |
|        | 0,8541         | 0,0000         | 0,1459         | 0,0141         | 0,0000         | 0,9859         |
|        | 0,0727         | 0,4369         | 0,4904         | 0,0039         | 0,0116         | 0,9845         |
|        | 0,8242         | 0,0000         | 0,1758         | 0,0136         | 0,0000         | 0,9864         |
| 313.15 | 0,5392         | 0,1022         | 0,3586         | 0,0144         | 0,0037         | 0,9819         |
|        | 0,3890         | 0,1564         | 0,4546         | 0,0077         | 0,0058         | 0,9865         |
|        | 0,2662         | 0,2215         | 0,5123         | 0,0085         | 0,0069         | 0,9846         |
|        | 0,2270         | 0,2467         | 0,5264         | 0,0081         | 0,0079         | 0,9840         |
|        | 0,1914         | 0,2681         | 0,5405         | 0,0065         | 0,0081         | 0,9854         |
|        | 0,0000         | 0,5255         | 0,4745         | 0,0000         | 0,0153         | 0,9847         |
|        | 0,0571         | 0,4456         | 0,4974         | 0,0044         | 0,0132         | 0,9823         |
|        |                |                |                |                |                |                |

**Tabel 4.2** Data eksperimen kesetimbangan cair-cair system  
Dimethyl Carbonate (1) + Tert-Butanol (2) + Air (3)

| T(K)   | Fase Organik   |                |                | Fase Aqueous   |                |                |
|--------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
|        | x <sub>1</sub> | x <sub>2</sub> | x <sub>3</sub> | x <sub>1</sub> | x <sub>2</sub> | x <sub>3</sub> |
| 303.15 | 0,7093         | 0,0701         | 0,2205         | 0,0293         | 0,0138         | 0,9569         |
|        | 0,6842         | 0,0794         | 0,2364         | 0,0443         | 0,0245         | 0,9312         |
|        | 0,6516         | 0,0946         | 0,2538         | 0,0504         | 0,0309         | 0,9187         |
|        | 0,5355         | 0,1121         | 0,3524         | 0,0538         | 0,0461         | 0,9001         |
|        | 0,3251         | 0,1360         | 0,5389         | 0,0986         | 0,0750         | 0,8264         |
|        | 0,7756         | 0,0517         | 0,1726         | 0,0141         | 0,0050         | 0,9809         |
|        | 0,8548         | 0,0000         | 0,1452         | 0,0141         | 0,0000         | 0,9859         |
| 313.15 | 0,4995         | 0,1202         | 0,3803         | 0,0481         | 0,0510         | 0,9009         |
|        | 0,1979         | 0,1068         | 0,6953         | 0,0607         | 0,0584         | 0,8809         |
|        | 0,6168         | 0,0955         | 0,2877         | 0,0353         | 0,0422         | 0,9225         |
|        | 0,6461         | 0,0846         | 0,2693         | 0,0376         | 0,0371         | 0,9253         |
|        | 0,7843         | 0,0407         | 0,1750         | 0,0290         | 0,0090         | 0,9619         |
|        | 0,7094         | 0,0648         | 0,2259         | 0,0410         | 0,0229         | 0,9361         |
|        | 0,8242         | 0,0000         | 0,1758         | 0,0136         | 0,0000         | 0,9864         |

Selanjutnya data eksperimen dikorelasikan dengan persamaan Bachman-Brown yang digunakan untuk memastikan *reliability* dari data eksperimen. Korelasi ini memberikan gambaran dari data eksperimen untuk kedua sistem (DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert-butanol + Air). Korelasi Bachman-Brown untuk kedua sistem pada suhu 303,15 K dan 313,15 K ditampilkan pada **Gambar 4.3**.



**Gambar 4.3** Korelasi Bachman-Brown ternery system DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert-butanol + Air pada 303,15 K dan 313,15 K

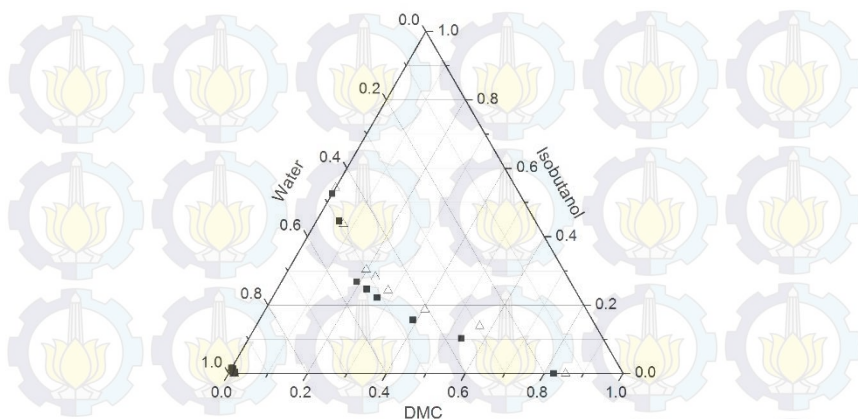
**Tabel 4.3** Bachman-Brown parameter

| Suhu     | Parameter | Iso-Butanol | Tert-Butanol |
|----------|-----------|-------------|--------------|
| 303.15 K | A         | 1.013       | 0.887        |
|          | B         | 0.0005      | 0.114        |
|          | R         | 1           | 0.994        |
| 313.15 K | A         | 1.014       | 0.99         |
|          | B         | 0.0004      | 0.045        |
|          | R         | 1           | 0.993        |

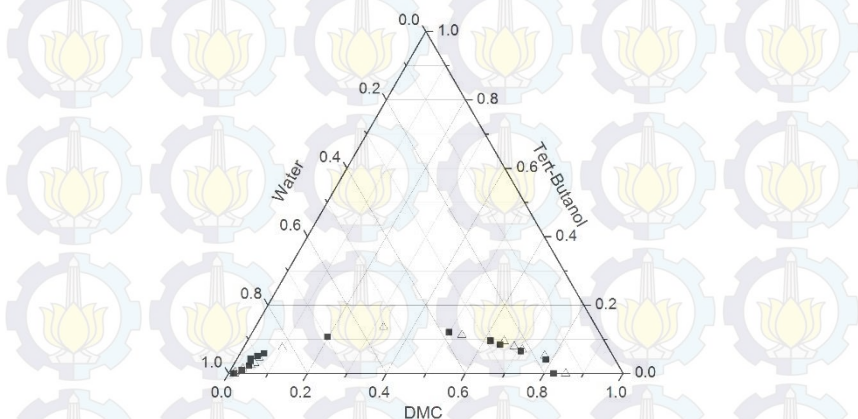
Berdasarkan Gambar 4.3 dan Tabel 4.3 terlihat bahwa hasil korelasi menunjukkan regresi untuk kedua sistem mendekati 1. Hal ini menunjukkan bahwa data eksperimen sudah valid dan *reliable*.

Kemudian data komposisi hasil eksperimen pada masing-masing suhu operasi digambarkan dalam diagram LLE system terner yang dapat dilihat pada Gambar 4.4 dan Gambar 4.5.





**Gambar 4.4** Hasil Eksperimen Kestimbangan Cair-Cair Sistem DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu (Δ) 303.15 K ; (■) 313.15 K



**Gambar 4.5** Hasil Eksperimen Kestimbangan Cair-Cair Sistem DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada (Δ) 303.15 K ; (■) 313.15 K



Berdasarkan Gambar 4.4 dan Gambar 4.5 terlihat komposisi kesetimbangan untuk kedua sistem pada suhu 303.15 K dan 313.15 K baik di fase organik maupun di fase aqueous. Untuk sistem DMC (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3) merupakan sistem dengan Treyball tipe II karena sistem tersebut memiliki 2 komponen senyawa yang sebagian tidak larut yaitu antara DMC (1) + Air (3) dan Iso-Butanol (2) + Air (3) sedangkan untuk sistem DMC (1) + Tert-Butanol (2) + Air (3) merupakan sistem dengan Treyball tipe I karena sistem tersebut memiliki 1 komponen senyawa yang sebagian tidak larut yaitu DMC (1) + Air (3).

Dari diagram LLE tersebut juga dapat disimpulkan bahwa untuk sistem DMC (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3) suhu berpengaruh secara signifikan terhadap data kesetimbangan. Ini dapat diketahui dari area dua fasa data eksperimen pada suhu 303,15 K yang lebih besar dibandingkan dengan area dua fasa pada suhu 313,15 K. Sedangkan untuk sistem DMC (1) + Tert-Butanol (2) + Air (3) dapat diketahui bahwa suhu tidak berpengaruh secara signifikan terhadap grafik LLE. Hal ini dapat dilihat dari area dua fasa yang hampir sama untuk suhu operasi 303,15 K dan 313,15 K.

Kecenderungan gugus polar  $-OH$  di dalam alkohol mempengaruhi besar nya kelarutan Alkohol dengan Air dimana semakin panjang rantai karbon pada alkohol akan mengurangi kelarutannya di dalam air. Dimana rantai karbon merupakan senyawa bersifat hidropobik sedangkan pada gugus  $OH$  bersifat hidrofilik sehingga semakin luas nya luas bagian hidropobik mengakibatkan berkurang nya kelarutan terhadap air. Tert-Butanol merupakan senyawa yang larut sempurna pada air, dimana ini terjadi karena senyawa hidrofilik lebih kuat terhadap gugus alkilnya sedangkan pada Iso-Butanol terjadi *gap* kelarutan terhadap Air dan ini terjadi karena luas area gugus alkil yang cukup besar.

## 4.2. Hasil Prediksi Kesetimbangan

### 4.2.1 Penentuan Parameter

Data hasil eksperimen yang diperoleh dikorelasikan dengan menggunakan persamaan NRTL dan UNIQUAC yang digunakan untuk sistem multikomponen. Penentuan parameter (*fitting*) dengan model NRTL, ditetapkan harga ( $\alpha = 0.2$ ) dimana harga tersebut berdasarkan eksperimen yang telah dilakukan oleh Hwang *et al*, (2012). Sedangkan penentuan parameter (*fitting*) dengan persamaan UNIQUAC ditentukan terlebih dahulu harga luas permukaan molekular (q) dan volume molekular (r) untuk tiap-tiap komponen. Pengujian validitas dilakukan berdasarkan acuan harga *root square mean deviation* (RMSD) yaitu penyimpangan absolute rata-rata komposisi antara data eksperimen dan hasil perhitungan menggunakan persamaan model. Pengujian dilakukan dengan cara membandingkan hasil perhitungan harga RMSD persamaan UNIQUAC dan NRTL pada masing-masing temperature. Adapun hasil parameter yang diperoleh dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC ditunjukkan pada tabel 4.4 – 4.5. Sedangkan parameter UNIQUAC yang digunakan dalam melakukan perhitungan persamaan UNIQUAC disajikan dalam tabel 4.4.

**Tabel 4.4** UNIQUAC Parameter Luas dan Volume molekul (Praunzitz, 2004)

| Chemicals    | UNIQUAC |       |
|--------------|---------|-------|
|              | r       | Q     |
| DMC          | 3,0613  | 2,816 |
| Iso-Butanol  | 3,4686  | 3,124 |
| Tert-Butanol | 3,9228  | 3,744 |
| Air          | 0,92    | 1,4   |

**Tabel 4.5** Hasil Parameter persamaan NRTL

| Sistem                       | NRTL parameter (K) |              |              | $\alpha$ | % RMSD |
|------------------------------|--------------------|--------------|--------------|----------|--------|
|                              | i-j                | $a_{ij}$     | $a_{ji}$     |          |        |
| DMC + Isobutanol<br>+ Air    | 1-2                | -<br>1842,26 | -<br>198,31  | 0,2      | 0,7    |
|                              | 2-3                | 2248,23      | 819,97       |          |        |
|                              | 1-3                | 3015,94      | 253,64       |          |        |
| DMC + Tert-<br>Butanol + Air | 1-2                | -<br>1242,07 | -<br>2856,75 | 0,2      | 0,7    |
|                              | 2-3                | -<br>1544,77 | -<br>2261,93 |          |        |
|                              | 1-3                | -<br>2778,45 | -<br>-323,41 |          |        |

**Tabel 4.6** Hasil Parameter persamaan UNIQUAC

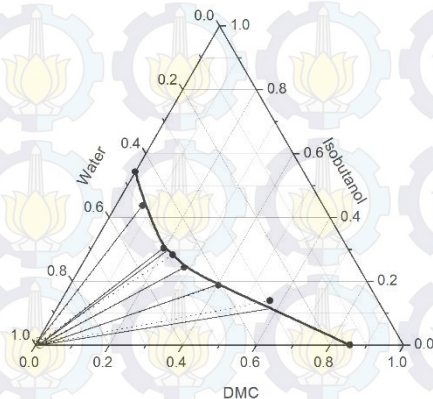
| Sistem                          | UNIQUAC parameter (K) |          |          | % RMSD |
|---------------------------------|-----------------------|----------|----------|--------|
|                                 | i-j                   | $a_{ij}$ | $a_{ji}$ |        |
| DMC + Isoutanol<br>+ Air        | 1-2                   | 57,56    | 80,26    | 0,6    |
|                                 | 2-3                   | 130,41   | 176,51   |        |
|                                 | 1-3                   | 246,43   | 229,99   |        |
| DMC + Tert-<br>Butanol<br>+ Air | 1-2                   | -4,08    | -137,82  | 0,6    |
|                                 | 2-3                   | 30,02    | 50,56    |        |
|                                 | 1-3                   | 238,58   | 197,04   |        |



*Fitting* parameter dilakukan dengan menggunakan satu data parameter untuk suhu 303,15 K dan suhu 313,15 K pada masing-masing sistem. Hasil yang didapatkan sangat baik sehingga parameter tunggal ini juga bisa digunakan untuk merepresentasikan data-data kesetimbangan untuk suhu 303,15 K – 313,15 K. Berdasarkan hasil korelasi pada Tabel 4.5 – 4.6 persamaan UNIQUAC dan NRTL menunjukkan hasil yang baik. Hal ini dapat dilihat melalui nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*) pada kedua persamaan (UNIQUAC dan NRTL) yang menunjukkan nilai RMSD kurang dari 1 %.

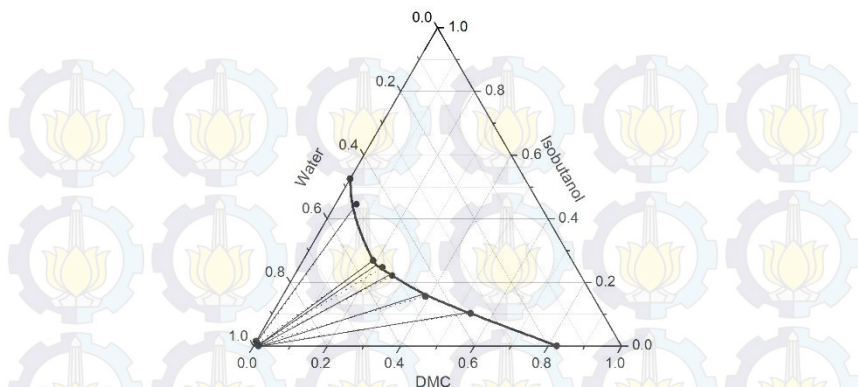
#### 4.2.2. Korelasi Data Kesetimbangan

Korelasi data kesetimbangan sistem ternar Dimethyl Carbonate + Isobutanol + Air dan sistem Dimethyl Carbonate + Tert-butanol + Air dengan menggunakan persamaan NRTL dan UNIQUAC ditunjukkan pada Gambar 4.6 sampai Gambar 4.13.

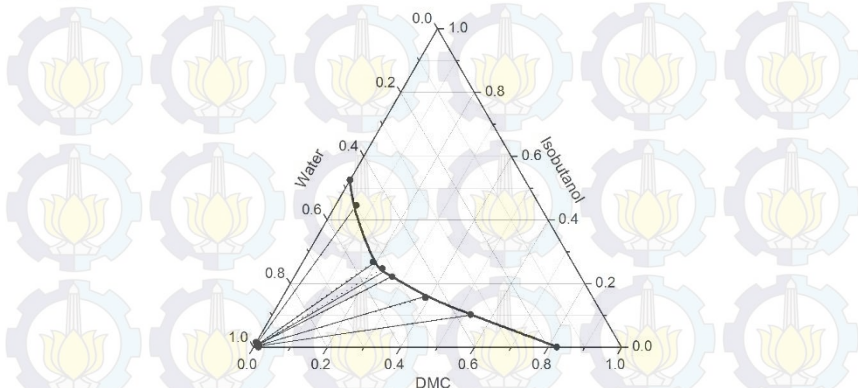


**Gambar 4.6** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 303,15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan NRTL

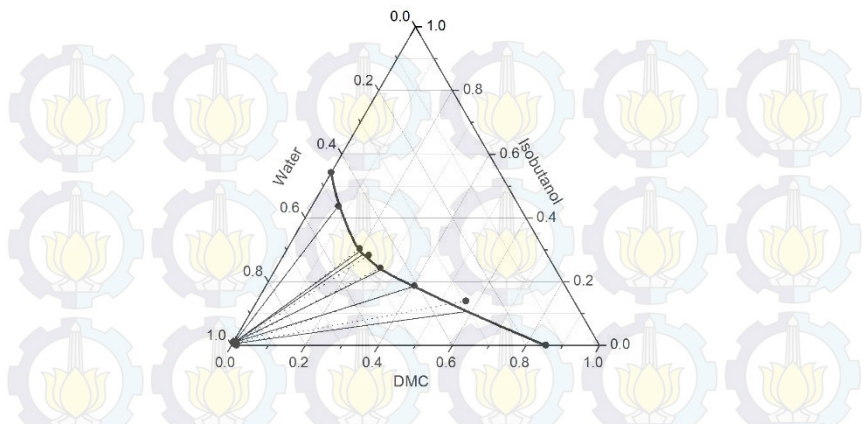




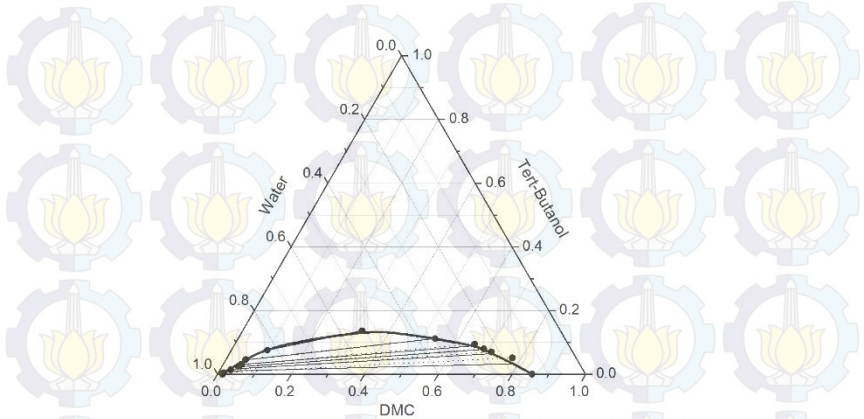
**Gambar 4.7** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan *Tie Line* dengan Persamaan NRTL



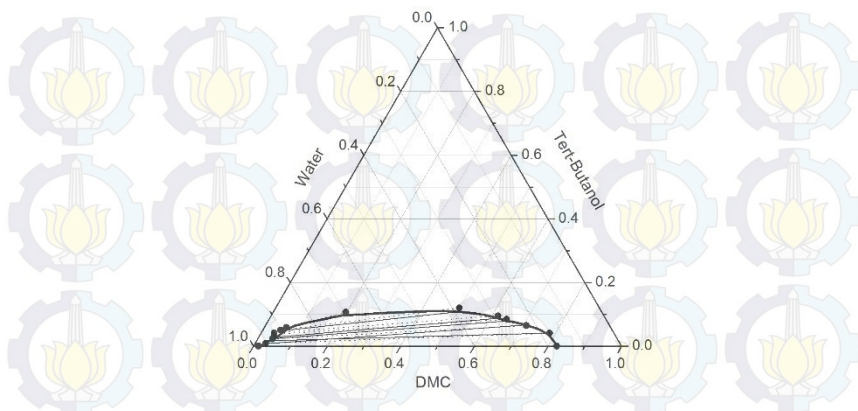
**Gambar 4.8** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 303.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan *Tie Line* dengan Persamaan UNIQUAC



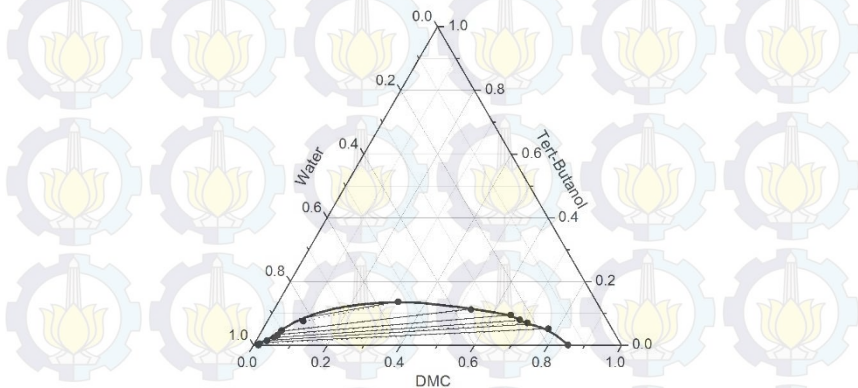
**Gambar 4.9** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC



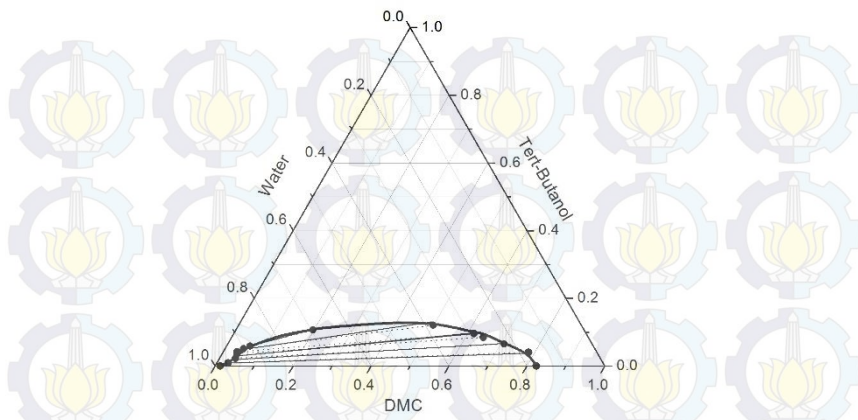
**Gambar 4.10** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 303.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan NRTL



**Gambar 4.11** Diagram Kesenimbangan Cair-Cair Sistem Terner DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan NRTL



**Gambar 4.12** Diagram Kesenimbangan Cair-Cair Sistem Terner DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 303.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC



**Gambar 4.13** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Terner DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC

Berdasarkan Gambar diatas dapat dilihat bahwa persamaan NRTL dan UNIQUAC dapat merepresentasikan data kesetimbangan LLE dengan sangat baik. Hal ini dapat juga dilihat dari nilai RMSD pada masing-masing persamaan yang sangat kecil (kurang dari 1 %).



## DAFTAR PUSTAKA

Adia, Tinjauan Pustaka Zat Aditif Bahan Bakar, Universitas Pendidikan Indonesia, Bandung 2008.

Advance Motor Fuels, 2011. Fuel Butanol Properties. Tersedia di [http://www.iea-amf.org/content/fuel\\_information/butanol/properties](http://www.iea-amf.org/content/fuel_information/butanol/properties).

Choi, C.H.; Reitz, R.Y. An Experimental Study on The Effects of Oxygenated Fuel Blends and Multiple Injection Strategies on Diesel Engine Emission, *Journal of Fuel*, **1999**, 78, 1303-1217.

Hwang, I.C.; Park, S.J.; and Han, J.K. Liquid-Liquid Equilibria for The Ternary System of Dimethyl Carbonate, Diphenyl Carbonate, Phenol and Water in 358,15 K and Atmospheric Pressure, *Fluid Phase Equilibria*, **2011**, 301, 18-21.

Hwang, I.C.; Park, S.J.; and J.S Choi. Liquid-Liquid Equilibria for the Binary System of di-isopropyl Ether (DIPE) + Water in between 288,15 and 323,15 K and the Ternary systems of DIPE + Water + C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> Alcohols at 298,15 K, *Fluid Phase Equilibria*, **2008**, 269, 1-5.

Jeong, I.Y.; You, S.H.; Park, S.J., Ternary liquid-liquid equilibria and binary excess and deviation properties at constant temperature for mixture of dimethyl carbonate, anisole, methanol, phenol and water, *Fluid Phase Equilibria*, **2014**, 378, 93-101.

Kadarohman A. Eksplorasi Minyak Atsiri sebagai Bioaditif Bahan Bakar, Program Study Kimia FMIPA, UPI Bandung, 2003.

Lewis, SR.; R.J. Condensed Chemical Dictionary 3<sup>rd</sup> ed. John Wiley & Sons, Inc. New York, USA, 1997.

Park, S.J.; Hwang, I.C.; Han, K.J. Liquid-liquid Equilibria for Ternary Systems of Dimethyl Carbonate + C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> Alcohols + Water at 298,15 K and Atmosphere Pressure, Journal of Industrial and Engineering Chemistry 18, **2012**, 499-503.

Pereiro A.B.; Canosa J.; Rodriguez A. Liquid-Liquid Equilibria of 1,3 dimethylimidazolium Methyl Sulfate with Ketones, Dialkyl Carbonates and Acetates, Fluid Phase Equilibria, **2007**, 254, 150-157.

Polling, B.E.; Prausnitz, J.M.; and O'Connell, J.P. The Properties Of Gases and Liquids, 5<sup>th</sup> edition, Singapore: Mc Graw-Hill International Edition, 2004.

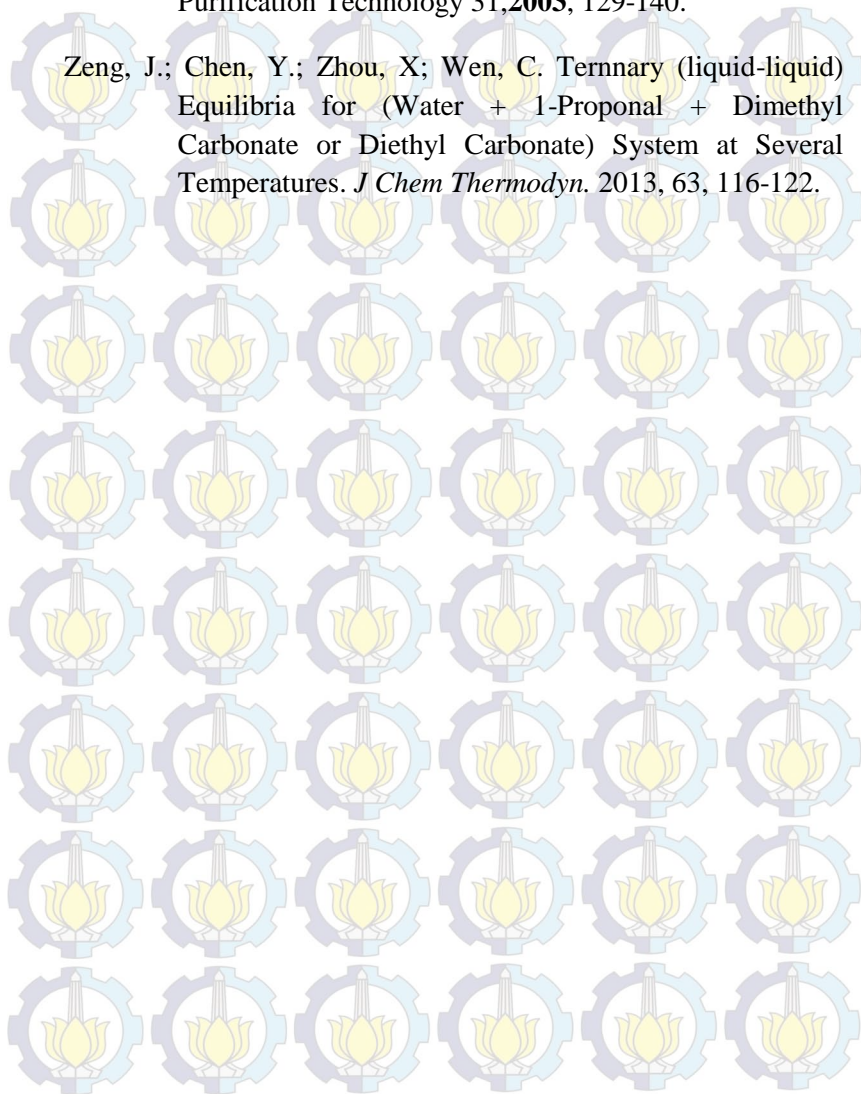
Song, J. Effect of Oxygenated Fuel on Combustion and Emissions in a Light-Duty Turbo Diesel Engine, The Pennsylvania State University, Pennsylvania : University Park, 2001.

Torre J.; Chafer A.; Berna A.; Munoz R. Liquid-Liquid Equilibria of the System Dimethyl Carbonate + Methanol + Water at Different Temperatures, Fluid Phase Equilibria, **2006**, 247, 40-46.

Won, W.; Feng, X.; Lawless, D. Separation of Dimethyl Carbonate/Methanol/ Water Mixtures by Pervaporation

Using Crosslinked Chitosan Membranes, Separation and Purification Technology 31,2003, 129-140.

Zeng, J.; Chen, Y.; Zhou, X; Wen, C. Ternary (liquid-liquid) Equilibria for (Water + 1-Propanol + Dimethyl Carbonate or Diethyl Carbonate) System at Several Temperatures. *J Chem Thermodyn.* 2013, 63, 116-122.







## **BAB V**

### **KESIMPULAN**

Dari hasil penelitian dan perhitungan yang telah dilakukan dapat ditarik kesimpulan sebagai berikut :

1. Didapatkan data kesetimbangan cair-cair sistem DMC + Isobutanol + Air dan sistem DMC + Tert-butanol + Air pada temperatur 303.15 K dan 313.15 K
2. Pada sistem DMC + Isobutanol + Air suhu berpengaruh secara signifikan pada data Kesetimbangan (LLE). Sedangkan pada sistem DMC + Tert-butanol + Air suhu tidak berpengaruh secara signifikan.
3. Untuk sistem ternary DMC+ Isobutanol + Air pada suhu 303,15 K dan 313,15 K dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC didapatkan RMSD masing-masing 0,7 % dan 0,6 %. Untuk sistem ternary DMC+ Tert-butanol + Air pada suhu 303,15 K dan 313,15 K dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC didapatkan RMSD masing-masing 0,7 % dan 0,6%.



## APPENDIKS

1. Perhitungan Mol Masing-Masing Komponen Dalam Sampel  
Diambil contoh perhitungan sampel sistem terner Dimethyl Carbonate+ Isobutanol + water pada suhu 30°C.

Diketahui.

Densitas Dimethyl Carbonate : 1,073g/ml

Densitas Tert-butanol : 0,775 g/ml

Densitas air : 1 g/ml

BM Dimethyl Carbonate : 90,08g/mol

BM Tert-butanol : 74,12 g/mol

BM air : 18 g/mol

Volume Dimethyl Carbonate : 12 mL

Volume Tert-butanol : 15 mL

Volume air : 3 mL

Perhitungan massa:

$$\begin{aligned}\text{Massa Dimethyl Carbonate} &= \rho \text{ Dimethyl Carbonate} \times \text{volume Dimethyl Carbonate} \\ &= 1,073 \text{ gram/ml} \times 12 \text{ ml} \\ &= 12,876 \text{ gram}\end{aligned}$$

Dengan cara yang sama didapatkan massa Tert-butanol dan massa air yaitu:

$$\text{Massa Isobutanol} = 11,625 \text{ gram}$$

$$\text{Massa air} = 3 \text{ gram}$$

Perhitungan mol komponen:

$$\begin{aligned}\text{Mol Dimethyl Carbonate}(n_1) &= \frac{\text{massa Dimethyl Carbonate}}{\text{BM Dimethyl Carbonate}} \\ &= \frac{12,876}{90,08} \\ &= 0,143 \text{ mol}\end{aligned}$$

Dengan cara yang sama didapatkan mol Tert-butanol( $n_2$ ) dan mol air ( $n_3$ ), yaitu:

$$n_2 = 0,1568 \text{ mol}$$

$$n_3 = 0,1667 \text{ mol}$$

Menghitung fraksi mol overall ( $z_i$ ) untuk masing-masing komponen dalam sampel:



$$\begin{aligned}\text{Mol total (n}_{\text{total}}) &= n_1 + n_2 + n_3 \\ &= 0,143\text{mol} + 0,1568\text{mol} + 0,1667\text{mol} \\ &= 0,4665\text{mol}\end{aligned}$$

$$\text{ZDimethyl Carbonate(z}_1) = \frac{n_1}{n_{\text{total}}} = \frac{0,143 \text{ mol}}{0,4665 \text{ mol}} = 0,3065$$

Dengan cara yang sama diperoleh z untuk masing-masing komponen dalam setiap sampel yang kemudian akan digunakan untuk menghitung kesetimbangan dengan model NRTL dan UNIQUAC.

## 2. Hasil analisa eksperimen dengan menggunakan *Gas Chromatography* (GC)

Sampel-sampel dari percobaan yang telah dilakukan selanjutnya dianalisa dengan menggunakan *Gas Chromatography* (GC) agar komposisi tiap-tiap komponen dapat diketahui. Berikut ini merupakan prosedur yang digunakan untuk memperoleh komposisi tiap sampel menggunakan *Gas Chromatography* (GC) :

### a. Perhitungan Kurva Kalibrasi

Kurva Kalibrasi menggunakan metode kalibrasi biner fraksi mol sebagai contoh digunakan perhitungan kalibrasi biner Dimethyl Carbonatedan Tert-butanolsebagai berikut:

➤ Menimbang berat masing-masing komponen murni (Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol) sehingga didapatkanperbandingan fraksi mol sebagai berikut:

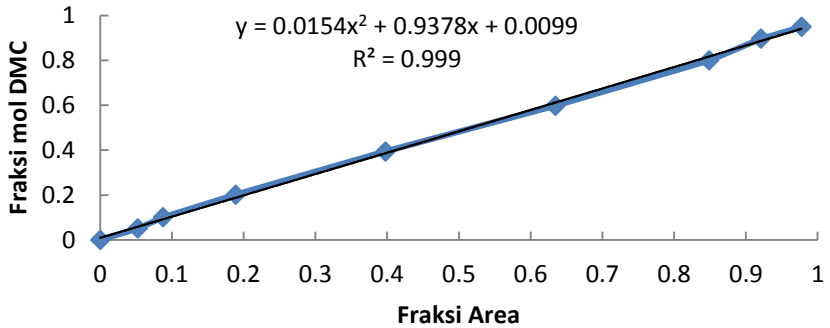
| Fraksi Mol | Massa Dimethyl Carbonate(gram) | Massa Tert-butanol (gram) |
|------------|--------------------------------|---------------------------|
| 1 : 0      | 9,008                          | 0                         |
| 0,8 : 0,2  | 7,2064                         | 1,4824                    |
| 0,6 : 0,4  | 5,4048                         | 2,9648                    |
| 0,4 : 0,6  | 3,6032                         | 4,4472                    |
| 0,2 : 0,8  | 1,8016                         | 5,9296                    |
| 0 : 1      | 0                              | 7,412                     |



- Menginjeksikan campuran Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol dengan perbandingan fraksi mol 1:0 ke dalam Gas Chromatography sebanyak 1  $\mu$ L
- Dari hasil analisa Gas Chromatography didapatkan area dan retention time
- Selanjutnya dengan prosedur yang sama menginjeksikan campuran Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol untuk perbandingan fraksi mol yang lain
- Membuat kurva kalibrasi untuk mendapatkan persamaan regresi untuk kalibrasi biner Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol dengan memplot fraksi area terhadap fraksi mol

| Fraksi Mol | Fraksi Area        |              |
|------------|--------------------|--------------|
|            | Dimethyl Carbonate | Tert-butanol |
| 1 : 0      | 1                  | 0            |
| 0,8 : 0,2  | 0,848694           | 0,151306     |
| 0,6 : 0,4  | 0,634593           | 0,365407     |
| 0,4 : 0,6  | 0,397471           | 0,602529     |
| 0,2 : 0,8  | 0,188731           | 0,811269     |
| 0 : 1      | 0                  | 1            |

## DMC



**Gambar 1** Kurva Kalibrasi Biner Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol

b. Perhitungan Komposisi Eksperimen

- Menginjeksikan sampel fase organik ke dalam Gas Chromatography sebanyak 1  $\mu\text{L}$
- Dari hasil analisa Gas Chromatography didapatkan area masing-masing komponen
- Mensubstitusi fraksi area masing-masing komponen ke persamaan regresi hasil dari kalibrasi untuk mendapatkan fraksi mol masing-masing komponen

Hasil Perhitungan Komposisi Sampel 1 Fase Organik Dimethyl Carbonate+ Tert-butanol + Air pada Temperatur 303.15 K

| Komponen           | Fraksi Area | Fraksi Mol |
|--------------------|-------------|------------|
| Dimethyl Carbonate | 0,21127     | 0,17294    |
| Tert-butanol       | 0,62485     | 0,52801    |
| Air                | 0,16388     | 0,29905    |
| <b>Total</b>       | <b>1</b>    | <b>1</b>   |

### 3. Menghitung Parameter NRTL

Untuk mencari parameter NRTL kita tentukan terlebih dahulu nilai  $\alpha = 0.2 - 0.47$ . Setelah itu diambil nilai awal harga parameter yang akan ditrial, antara lain  $a_{ij}$  dan  $a_{ji}$  yang akan digunakan menghitung  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$  dengan persamaan sebagai berikut:

$$\tau_{ij} = \frac{a_{ij}}{RT} \quad (1)$$

$$\tau_{ji} = \frac{a_{ji}}{RT} \quad (2)$$

Setelah didapatkan  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$ , maka langkah selanjutnya adalah menghitung  $G_{ij}$  dan  $G_{ji}$ :

$$G_{ij} = \exp(-\alpha\tau_{ij}) \quad (3)$$

$$G_{ji} = \exp(-\alpha\tau_{ji}) \quad (4)$$

Dimana:

$$\tau_{ii} = 0$$

$$G_{ii} = 1$$

Kemudian parameter-parameter tersebut digunakan untuk menghitung  $\gamma_i$ :

$$\ln\gamma_i = \frac{\sum_j^N \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_k^N G_{ki} x_k} + \sum_j^N \frac{G_{ij} x_j}{\sum_k^N G_{kj} x_k} \left( \tau_{ij} - \frac{\sum_k^N x_k \tau_{kj} G_{kj}}{\sum_k^N G_{kj} x_k} \right) \quad (5)$$

Kemudian menghitung nilai F :

$$F(\gamma_i^a, \gamma_i^b, X_i^a, X_i^b) = (\ln\gamma_i^a - \ln\gamma_i^b) - \ln \frac{X_i^b}{X_i^a} \quad (6)$$

Selanjutnya adalah meminimalkan nilai F untuk mendapatkan parameter yang sesuai. Kemudian menghitung nilai  $K_i$ :

$$\text{Neraca Massa Total} : F_i = L^a + L^b$$

$$\text{Neraca Massa Komponen} : F_i Z_i = L^a X_i^a + L^b X_i^b$$

$$L^b = F_i - L^a$$

$$F_i Z_i = L^a X_i^a + (F_i - L^a) X_i^b$$

Dibagi dengan  $F_i$  akan menghasilkan persamaan :

$$Z_i = \frac{L^a}{F_i} X_i^a + \left(1 - \frac{L^a}{F_i}\right) X_i^b$$

$$\text{Dimana } \beta = \frac{L^a}{F_i} \text{ dan } K_i = \frac{X_i^a}{X_i^b} = \frac{\gamma_i^b}{\gamma_i^a}$$

Sehingga :

$$Z_i = \beta X_i^a + (1-\beta)X_i^b$$

$$Z_i = \beta X_i^a + (1-\beta)X_i^a/K_i$$

Dikali dengan  $K_i$  :

$$Z_i K_i = \beta X_i^a K_i + (1-\beta)X_i^a$$

$$Z_i K_i = X_i^a (\beta K_i + (1-\beta))$$

Maka diperoleh perhitungan flash calculation :

$$X_i^a = \frac{Z_i K_i}{\beta K_i + (1-\beta)} = \frac{Z_i K_i}{1 + \beta(K_i - 1)} \quad (7)$$

$$X_i^b = \frac{Z_i}{1 + \beta(K_i - 1)} \quad (8)$$

Nilai  $\beta$  pada persamaan di atas ditrial sehingga untuk mendapat nilai  $\beta$  yang sesuai dilakukan solver dengan meminimalkan nilai objective function.

#### 4. Menghitung Parameter UNIQUAC

Untuk menghitung parameter UNIQUAC, yang akan dicari adalah  $u_{ij}$  dan  $u_{ji}$  dimana data ini kemudian digunakan untuk menghitung  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$  dengan persamaan sebagai berikut:

$$\tau_{ij} = \exp\left(-\frac{u_{ij}}{RT}\right) \quad (9)$$

$$\tau_{ji} = \exp\left(-\frac{u_{ji}}{RT}\right) \quad (10)$$

Kemudian dihitung nilai  $l_i$ ,  $r_i$ , dan  $q_i$  dimana  $r_i$  adalah parameter volume komponen  $i$  dan  $q_i$  adalah parameter luasan komponen  $i$ .

$$l_i = \frac{z}{2}(r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (11)$$

$$\varphi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (12)$$

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad (13)$$

Setelah didapatkan harga-harga parameter diatas, langkah selanjutnya adalah menghitung nilai  $\gamma_i$  dengan persamaan:

$$\ln \gamma_i = \ln \frac{\varphi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\varphi_i} + l_i - \frac{\varphi_i}{x_i} \sum_j^N x_j l_j - q_i \ln \left( \sum_j^N \theta_j \tau_{ji} \right) + q_i - q_i \sum_j^N \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_k^N \theta_k \tau_{kj}} \quad (14)$$

Dimana nilai  $z=10$

Kemudian menghitung nilai  $F$  :



$$F(\gamma_i^a, \gamma_i^b, X_i^a, X_i^b) = (\ln \gamma_i^a - \ln \gamma_i^b) - \ln \frac{X_i^b}{X_i^a} \quad (15)$$

Selanjutnya adalah meminimalkan nilai F untuk mendapatkan parameter yang sesuai. Kemudian menghitung nilai Ki :

Neraca Massa Total :  $F_i = L^a + L^b$

Neraca Massa Komponen :  $F_i Z_i = L^a X_i^a + L^b X_i^b$

$$L^b = F_i - L^a$$

$$F_i Z_i = L^a X_i^a + (F_i - L^a) X_i^b$$

Dibagi dengan  $F_i$  akan menghasilkan persamaan :

$$Z_i = \frac{L^a}{F_i} X_i^a + (1 - \frac{L^a}{F_i}) X_i^b$$

$$\text{Dimana } \beta = \frac{L^a}{F_i} \text{ dan } K_i = \frac{X_i^a}{X_i^b} = \frac{\gamma_i^b}{\gamma_i^a}$$

Sehingga :

$$Z_i = \beta X_i^a + (1 - \beta) X_i^b$$

$$Z_i = \beta X_i^a + (1 - \beta) X_i^a / K_i$$

Dikali dengan  $K_i$  :

$$Z_i K_i = \beta X_i^a K_i + (1 - \beta) X_i^a$$

$$Z_i K_i = X_i^a (\beta K_i + (1 - \beta))$$

Maka diperoleh perhitungan flash calculation :

$$X_i^a = \frac{Z_i K_i}{\beta K_i + (1 - \beta)} = \frac{Z_i K_i}{1 + \beta(K_i - 1)} \quad (16)$$

$$X_i^b = \frac{Z_i}{1 + \beta(K_i - 1)} \quad (17)$$

Nilai  $\beta$  pada persamaan di atas ditrial sehingga untuk mendapat nilai  $\beta$  yang sesuai dilakukan solver dengan meminimalkan nilai objective function.

5. Perhitungan Deviasi Hasil Percobaan dengan Hasil Perhitungan  
Setelah mendapatkan komposisi kesetimbangan masing-masing komponen, langkah selanjutnya yaitu mengevaluasi hasil fitting parameter dengan menggunakan perhitungan deviasi, dalam hal ini adalah root mean square deviations (RMSD). Persamaannya sebagai berikut:

$$OF = \sum_{n=1}^N \sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2$$

Dimana n adalah jumlah tie line; i, j, dan k adalah komponen, fase, dan tie line. Setelah itu menghitung nilai RMSD dengan persamaan,

$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2}{6n}}$$

## 6. Contoh Perhitungan

### 6.1 Perhitungan Menggunakan Persamaan NRTL

Berikut adalah contoh perhitungan prediksi kesetimbangan dengan model NRTL untuk sampel Dimethyl Carbonate+ Tert-butanol +air pada suhu 303,15 K. Diketahui dari data eksperimen:

$$\begin{aligned} x_1^a &= 0,70933 \\ x_2^a &= 0,07013 \\ x_3^a &= 0,22053 \\ x_1^b &= 0,0293 \\ x_2^b &= 0,01378 \\ x_3^b &= 0,95692 \end{aligned}$$

ditetapkan harga  $\alpha = 0,2$ ;  $R = 8,314 \text{ J/mol.K}$ ;  $T = 303,15 \text{ K}$ .

Langkah pertama yaitu trial harga  $a_{ij}$  dan  $a_{ji}$  sehingga didapatkan nilai  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$  dengan persamaan (1) dan (2) sehingga diperoleh :

| Komponen   | $\tau_{ij}$ | $\tau_{ji}$ |
|------------|-------------|-------------|
| <b>1-2</b> | 0,03968     | 0,03968     |
| <b>1-3</b> | 0,03968     | 0,03968     |
| <b>2-3</b> | 0,03968     | 0,03968     |

Langkah selanjutnya adalah menghitung  $G_{ij}$  dan  $G_{ji}$  dengan persamaan (3) dan (4) sehingga diperoleh :

| Komponen   | $G_{ij}$ | $G_{ji}$ |
|------------|----------|----------|
| <b>1-2</b> | 0,992096 | 0,992096 |

|            |          |          |
|------------|----------|----------|
| <b>1-3</b> | 0,992096 | 0,992096 |
| <b>2-3</b> | 0,992096 | 0,992096 |

Setelah didapatkan harga parameter di atas, kemudian menghitung  $\gamma_i$  dengan menggunakan persamaan (5) sehingga diperoleh :

$$\gamma_1^a = 1,05808$$

$$\gamma_2^a = 1,01749$$

$$\gamma_3^a = 1,02267$$

$$\gamma_1^b = 1,01018$$

$$\gamma_2^b = 1,03496$$

$$\gamma_3^b = 1,05104$$

Selanjutnya meminimalkan nilai F dengan persamaan (6) sehingga didapatkan parameter interaksi  $a_{ij}$  dan  $a_{ji}$  yang sesuai yaitu :

| Komponen   | $a_{ij}$ | $a_{ji}$ |
|------------|----------|----------|
| <b>1-2</b> | 563.43   | -3360,88 |
| <b>1-3</b> | 2768.51  | -366.978 |
| <b>2-3</b> | -2256.4  | 2242.86  |

Kemudian menghitung  $K_1$

$$K_i = \frac{\gamma_i^b}{\gamma_i^a}$$

$$K_1 = 25,85531$$

Dengan cara yang sama didapatkan:

$$K_2 = 4,808032$$

$$K_3 = 0,241897$$

Dari data awal diketahui:

$$z_1 = 0,491$$

$$z_2 = 0,056$$

$$z_3 = 0,453$$

Trial nilai  $\beta$  dengan nilai 0,5

Kemudian menghitung komposisi kesetimbangan dengan perhitungan flash calculation pada persamaan (7) dan (8):

$$x_1^a = 0,78860$$

$$x_1^b = 0,04779$$



Dengan cara yang sama didapatkan

$$x_2^a = 0,06780$$

$$x_2^b = 0,02209$$

$$x_3^a = 0,14359$$

$$x_3^b = 0,93011$$

Setelah dilakukan solver untuk mendapatkan nilai  $\beta$  yang sesuai didapatkan komposisi kesetimbangan yang baru yaitu :

$$x_1^a = 0,71158$$

$$x_1^b = 0,02865$$

$$x_2^a = 0,06602$$

$$x_2^b = 0,01429$$

$$x_3^a = 0,22239$$

$$x_3^b = 0,95705$$

#### Perhitungan Deviasi Hasil Percobaan dengan Hasil Perhitungan

Untuk menghitung nilai objection function (OF) dengan memasukkan data eksperimen:

$$x_1^a = 0,70933$$

$$x_2^a = 0,07013$$

$$x_3^a = 0,22053$$

$$x_1^b = 0,0293$$

$$x_2^b = 0,01378$$

$$x_3^b = 0,95692$$

Dan data hasil perhitungan

$$x_1^a = 0,71158$$

$$x_1^b = 0,02865$$

$$x_2^a = 0,06602$$

$$x_2^b = 0,01429$$

$$x_3^a = 0,22239$$

$$x_3^b = 0,95705$$

Menggunakan persamaan



$$OF = \sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2$$

Setelah mendapatkan parameter, langkah selanjutnya yaitu menghitung RMSD dengan menggunakan persamaan:

$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2}{6n}}$$

Sehingga didapatkan harga RMSD sebesar 0,46 %.

## 6.2 Perhitungan Menggunakan Persamaan UNIQUAC

Berikut adalah contoh perhitungan prediksi kesetimbangan dengan model NRTL untuk sampel Dimethyl Carbonate + Tert-butanol +air pada suhu 303,15 K. Diketahui dari data eksperimen:

$$x_1^a = 0,70933$$

$$x_2^a = 0,07013$$

$$x_3^a = 0,22053$$

$$x_1^b = 0,0293$$

$$x_2^b = 0,01378$$

$$x_3^b = 0,95692$$

Ditetapan harga  $R=8.314 \text{ j/mol.K}$ ;  $T=303.15 \text{ K}$

Langkah pertama yaitu trial harga  $u_{ij}$  dan  $u_{ji}$  sehingga didapatkan nilai  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$  dengan persamaan (9) dan (10) sehingga diperoleh :

Komponen

|            |             |             |
|------------|-------------|-------------|
| <b>1-2</b> | $\tau_{ij}$ | $\tau_{ji}$ |
|            | 0,9611      | 0, 9611     |

|            |         |         |
|------------|---------|---------|
| <b>1-3</b> | 0, 9611 | 0, 9611 |
|------------|---------|---------|

|            |         |         |
|------------|---------|---------|
| <b>2-3</b> | 0, 9611 | 0, 9611 |
|------------|---------|---------|

Diketahui data parameter luasan dan volume:

$$r_1 = 3,0613$$

$$r_2 = 3,9228$$

$$r_3 = 0,92$$

$$q_1 = 2,816$$

$$q_2 = 3,744$$

$$q_3 = 1.4$$

Kemudian dihitung nilai  $l_i$ ,  $\varphi_i$ , dan  $\theta_i$  menggunakan persamaan (11), (12), dan (13).

$$I_1 = -2.32$$

$$I_2 = -2,0288$$

$$I_3 = -0,8348$$

$$\varphi_1^a = 0,40715$$

$$\varphi_2^a = 0,17164$$

$$\varphi_3^a = 0,42121$$

$$\varphi_1^b = 0,00895$$

$$\varphi_2^b = 0,01796$$

$$\varphi_3^b = 0,97309$$

$$\theta_1^a = 0,52917$$

$$\theta_2^a = 0,13991$$

$$\theta_3^a = 0,33092$$

$$\theta_1^b = 0,01472$$

$$\theta_2^b = 0,01850$$

$$\theta_3^b = 0,96677$$

Langkah selanjutnya adalah menghitung  $\gamma_i$  untuk fase atas dan bawah dengan menggunakan persamaan (14) didapatkan:

$$\gamma_1^a = 1,53933$$

$$\gamma_2^a = 0,00834$$

$$\gamma_3^a = 53,98795$$

$$\gamma_1^b = 40,67201$$

$$\gamma_2^b = 0,04442$$

$$\gamma_3^b = 0,9301$$

Selanjutnya meminimalkan nilai F dengan persamaan (15) sehingga didapatkan parameter interaksi  $u_{ij}$  dan  $u_{ji}$  yang sesuai yaitu :

Komponen

$a_{ij}$

$a_{ji}$

**1-2**

-190,513

-269,162

|            |         |          |
|------------|---------|----------|
| <b>1-3</b> | 142,391 | 628,715  |
| <b>2-3</b> | 137,362 | -95,6849 |

Kemudian menghitung  $K_1$

$$K_i = \frac{\gamma_i^b}{\gamma_i^a}$$

$$K_1 = 26,4219$$

Dengan cara yang sama didapatkan:

$$K_2 = 5,32647$$

$$K_3 = 0,23323$$

Dari data awal diketahui:

$$z_1 = 0,491$$

$$z_2 = 0,056$$

$$z_3 = 0,453$$

Trial nilai  $\beta$  dengan nilai 0,5

Kemudian menghitung komposisi kesetimbangan dengan perhitungan flash calculation pada persamaan (16) dan (17):

$$x_1^a = 0,79112$$

$$x_1^b = 0,04663$$

Dengan cara yang sama didapatkan

$$x_2^a = 0,06913$$

$$x_2^b = 0,02021$$

$$x_3^a = 0,13975$$

$$x_3^b = 0,93316$$

Setelah dilakukan solver untuk mendapatkan nilai  $\beta$  yang sesuai didapatkan komposisi kesetimbangan yang baru yaitu:

$$x_1^a = 0,71173$$

$$x_1^b = 0,02723$$

$$x_2^a = 0,06672$$

$$x_2^b = 0,01266$$

$$x_3^a = 0,22155$$

$$x_3^b = 0,96011$$

|                    |                |              |                  |               |              |
|--------------------|----------------|--------------|------------------|---------------|--------------|
| <u>Perhitungan</u> | <u>Deviasi</u> | <u>Hasil</u> | <u>Percobaan</u> | <u>dengan</u> | <u>Hasil</u> |
| <u>Perhitungan</u> |                |              |                  |               |              |



Untuk menghitung nilai objection function (OF) dengan memasukkan data eksperimen:

$$x_1^a = 0,70933$$

$$x_2^a = 0,07013$$

$$x_3^a = 0,22053$$

$$x_1^b = 0,0293$$

$$x_2^b = 0,01378$$

$$x_3^b = 0,95692$$

Dan data hasil perhitungan

$$x_1^a = 0,71173$$

$$x_1^b = 0,02723$$

$$x_2^a = 0,06672$$

$$x_2^b = 0,01266$$

$$x_3^a = 0,22155$$

$$x_3^b = 0,96011$$

Menggunakan persamaan

$$OF = \sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2$$

Setelah mendapatkan parameter, langkah selanjutnya yaitu menghitung RMSD dengan menggunakan persamaan:

$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2}{6n}}$$

Sehingga didapatkan harga RMSD sebesar 0,53 %.



## LAMPIRAN

## 1. RMSD NRTL sistem DMC(1) + Iso-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 303.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{\text{exp}}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{\text{cal}}$ ) |        |        | $(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{cal}})^2$ |          |         |
|--------|---------|-----------------------------------|--------|--------|------------------------------------|--------|--------|---|----------|---------|
|        |         | $X_1$                             | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                              | $X_2$  | $X_3$  | DMC                                       | ISO      | AIR     |
| 1      | Organik | 0,0000                            | 0,5428 | 0,4573 | 0,0000                             | 0,5428 | 0,4572 | 0   | 3,01E-10 | 3E-10   |
|        | Aqueous | 0,0000                            | 0,0126 | 0,9874 | 0,0000                             | 0,0119 | 0,9881 | 0   | 6,11E-07 | 6,1E-07 |
| 2      | Organik | 0,1969                            | 0,3039 | 0,4993 | 0,1953                             | 0,3052 | 0,4994 | 2,4E-06                                   | 1,91E-06 | 3E-08   |
|        | Aqueous | 0,0087                            | 0,0096 | 0,9817 | 0,0104                             | 0,0041 | 0,9854 | 3E-06                                     | 2,99E-05 | 1,4E-05 |
| 3      | Organik | 0,2311                            | 0,2832 | 0,4857 | 0,2119                             | 0,2997 | 0,4884 | 0,00037                                   | 0,000273 | 6,8E-06 |
|        | Aqueous | 0,0051                            | 0,0085 | 0,9864 | 0,0113                             | 0,0030 | 0,9857 | 3,9E-05                                   | 3,03E-05 | 5,1E-07 |
| 4      | Organik | 0,2827                            | 0,2433 | 0,4740 | 0,2821                             | 0,2437 | 0,4742 | 4,3E-07                                   | 1,58E-07 | 6,8E-08 |
|        | Aqueous | 0,0091                            | 0,0002 | 0,9906 | 0,0151                             | 0,0019 | 0,9830 | 3,6E-05                                   | 2,67E-06 | 5,8E-05 |
| 5      | Organik | 0,4041                            | 0,1871 | 0,4089 | 0,4015                             | 0,1901 | 0,4085 | 6,8E-06                                   | 9E-06    | 1,5E-07 |
|        | Aqueous | 0,0122                            | 0,0005 | 0,9874 | 0,0179                             | 0,0008 | 0,9813 | 3,2E-05                                   | 1,03E-07 | 3,6E-05 |
| 6      | Organik | 0,5673                            | 0,1389 | 0,2938 | 0,5827                             | 0,1147 | 0,3025 | 0,00024                                   | 0,000584 | 7,7E-05 |
|        | Aqueous | 0,0107                            | 0,0005 | 0,9888 | 0,0144                             | 0,0002 | 0,9853 | 1,4E-05                                   | 6,61E-08 | 1,2E-05 |
| 7      | Organik | 0,8541                            | 0,0000 | 0,1459 | 0,8542                             | 0,0000 | 0,1458 | 2,6E-09                                   | 0        | 2,6E-09 |
|        | Aqueous | 0,0141                            | 0,0000 | 0,9859 | 0,0096                             | 0,0000 | 0,9904 | 2E-05                                     | 0        | 2E-05   |
| 8      | Organik | 0,0727                            | 0,4369 | 0,4904 | 0,0728                             | 0,4452 | 0,4982 | 3,2E-08                                   | 6,76E-05 | 6E-05   |
|        | Aqueous | 0,0049                            | 0,0133 | 0,9819 | 0,0020                             | 0,0097 | 0,9849 | 8,2E-06                                   | 1,24E-05 | 9,5E-06 |
| OF     |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,0019154                                 |          |         |

2. RMSD NRTL sistem DMC(1) + Iso-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 313.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{\text{exp}}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{\text{cal}}$ ) |        |        | $(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{cal}})^2$ |          |         |
|--------|---------|-----------------------------------|--------|--------|------------------------------------|--------|--------|---|----------|---------|
|        |         | $X_1$                             | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                              | $X_2$  | $X_3$  | DMC                                       | ISO      | AIR     |
| 1      | Organik | 0,8242                            | 0,0000 | 0,1758 | 0,8241                             | 0,0000 | 0,1759 | 7,4E-10                                   | 0        | 7,4E-10 |
|        | Aqueous | 0,0136                            | 0,0000 | 0,9864 | 0,0151                             | 0,0000 | 0,9849 | 2,2E-06                                   | 0        | 2,2E-06 |
| 2      | Organik | 0,5392                            | 0,1022 | 0,3586 | 0,5399                             | 0,1011 | 0,3590 | 5,1E-07                                   | 1,13E-06 | 1,2E-07 |
|        | Aqueous | 0,0144                            | 0,0037 | 0,9819 | 0,0119                             | 0,0041 | 0,9840 | 6,1E-06                                   | 1,91E-07 | 4,1E-06 |
| 3      | Organik | 0,3890                            | 0,1564 | 0,4546 | 0,3865                             | 0,1597 | 0,4538 | 6,2E-06                                   | 1,08E-05 | 6,3E-07 |
|        | Aqueous | 0,0077                            | 0,0058 | 0,9865 | 0,0089                             | 0,0051 | 0,9860 | 1,5E-06                                   | 5,13E-07 | 2,8E-07 |
| 4      | Organik | 0,2662                            | 0,2215 | 0,5123 | 0,2649                             | 0,2229 | 0,5122 | 1,7E-06                                   | 1,81E-06 | 2,6E-09 |
|        | Aqueous | 0,0082                            | 0,0059 | 0,9859 | 0,0085                             | 0,0065 | 0,9850 | 9,7E-08                                   | 3,28E-07 | 7,8E-07 |
| 5      | Organik | 0,2270                            | 0,2467 | 0,5264 | 0,2334                             | 0,2404 | 0,5263 | 4,1E-05                                   | 3,97E-05 | 8,7E-09 |
|        | Aqueous | 0,0077                            | 0,0055 | 0,9869 | 0,0085                             | 0,0066 | 0,9849 | 6,5E-07                                   | 1,3E-06  | 3,8E-06 |
| 6      | Organik | 0,1914                            | 0,2681 | 0,5405 | 0,1939                             | 0,2658 | 0,5403 | 6,4E-06                                   | 5,18E-06 | 6E-08   |
|        | Aqueous | 0,0065                            | 0,0081 | 0,9854 | 0,0081                             | 0,0072 | 0,9848 | 2,5E-06                                   | 8,54E-07 | 4,5E-07 |
| 7      | Organik | 0,0000                            | 0,5255 | 0,4745 | 0,0000                             | 0,5310 | 0,4846 | 0   | 3,02E-05 | 0,0001  |
|        | Aqueous | 0,0000                            | 0,0153 | 0,9847 | 0,0000                             | 0,0068 | 0,9932 | 0   | 7,26E-05 | 7,3E-05 |
| 8      | Organik | 0,0571                            | 0,4456 | 0,4974 | 0,0534                             | 0,4226 | 0,5261 | 1,3E-05                                   | 0,000528 | 0,00083 |
|        | Aqueous | 0,0050                            | 0,0087 | 0,9863 | 0,0037                             | 0,0071 | 0,9565 | 1,6E-06                                   | 2,76E-06 | 0,00088 |

**OF**  
**% RMSD**

0,003236  
0,732

3. RMSD NRTL sistem DMC(1) + Tert-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 303.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{exp}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{cal}$ ) |        |        | $(X_i^{exp} - X_i^{cal})^2$ |          |         |
|--------|---------|----------------------------|--------|--------|-----------------------------|--------|--------|-----------------------------|----------|---------|
|        |         | $X_1$                      | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                       | $X_2$  | $X_3$  | DMC                         | TERT     | AIR     |
| 1      | Organik | 0,7093                     | 0,0701 | 0,2205 | 0,7114                      | 0,0666 | 0,2219 | 4,3E-06                     | 1,22E-05 | 2E-06   |
|        | Aqueous | 0,0293                     | 0,0138 | 0,9569 | 0,0267                      | 0,0128 | 0,9606 | 6,9E-06                     | 1,05E-06 | 1,3E-05 |
| 2      | Organik | 0,6842                     | 0,0794 | 0,2364 | 0,6830                      | 0,0827 | 0,2342 | 1,4E-06                     | 1,09E-05 | 4,6E-06 |
|        | Aqueous | 0,0443                     | 0,0245 | 0,9312 | 0,0369                      | 0,0192 | 0,9438 | 5,4E-05                     | 2,77E-05 | 0,00016 |
| 3      | Organik | 0,6516                     | 0,0946 | 0,2538 | 0,6516                      | 0,0960 | 0,2524 | 4,6E-11                     | 1,97E-06 | 2E-06   |
|        | Aqueous | 0,0504                     | 0,0309 | 0,9187 | 0,0417                      | 0,0279 | 0,9304 | 7,5E-05                     | 8,93E-06 | 0,00014 |
| 4      | Organik | 0,5355                     | 0,1121 | 0,3524 | 0,5344                      | 0,1116 | 0,3540 | 1,2E-06                     | 2,29E-07 | 2,5E-06 |
|        | Aqueous | 0,0538                     | 0,0461 | 0,9001 | 0,0634                      | 0,0468 | 0,8898 | 9,3E-05                     | 4,3E-07  | 0,00011 |
| 5      | Organik | 0,3251                     | 0,1360 | 0,5389 | 0,3280                      | 0,1263 | 0,5457 | 8,2E-06                     | 9,34E-05 | 4,6E-05 |
|        | Aqueous | 0,0986                     | 0,0750 | 0,8264 | 0,0940                      | 0,0948 | 0,8112 | 2,1E-05                     | 0,000391 | 0,00023 |
| 6      | Organik | 0,7756                     | 0,0517 | 0,1726 | 0,7756                      | 0,0515 | 0,1729 | 5,8E-10                     | 4,16E-08 | 5,2E-08 |
|        | Aqueous | 0,0141                     | 0,0050 | 0,9809 | 0,0182                      | 0,0064 | 0,9754 | 1,7E-05                     | 1,92E-06 | 3,1E-05 |
| 7      | Organik | 0,8548                     | 0,0000 | 0,1452 | 0,8548                      | 0,0000 | 0,1452 | 9,9E-12                     | 0        | 9,9E-12 |
|        | Aqueous | 0,0141                     | 0,0000 | 0,9859 | 0,0143                      | 0,0000 | 0,9857 | 4,2E-08                     | 0        | 4,2E-08 |

**OF**

0,001281



4. RMSD NRTL sistem DMC(1) + Tert-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 313.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{\text{exp}}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{\text{cal}}$ ) |        |        | $(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{cal}})^2$ |          |         |
|--------|---------|-----------------------------------|--------|--------|------------------------------------|--------|--------|---|----------|---------|
|        |         | $X_1$                             | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                              | $X_2$  | $X_3$  | DMC                                       | TERT     | AIR     |
| 1      | Organik | 0,4995                            | 0,1202 | 0,3803 | 0,4994                             | 0,1188 | 0,3818 | 9,1E-10                                   | 1,91E-06 | 2E-06   |
|        | Aqueous | 0,0481                            | 0,0510 | 0,9009 | 0,0501                             | 0,0575 | 0,8924 | 4E-06                                     | 4,23E-05 | 7,2E-05 |
| 2      | Organik | 0,1979                            | 0,1068 | 0,6953 | 0,1979                             | 0,1001 | 0,6900 | 1E-10                                     | 4,46E-05 | 2,8E-05 |
|        | Aqueous | 0,0607                            | 0,0584 | 0,8809 | 0,0607                             | 0,0584 | 0,8809 | 4E-10                                     | 8,94E-10 | 1E-10   |
| 3      | Organik | 0,6168                            | 0,0955 | 0,2877 | 0,6111                             | 0,1051 | 0,2838 | 3,2E-05                                   | 9,23E-05 | 1,6E-05 |
|        | Aqueous | 0,0353                            | 0,0422 | 0,9225 | 0,0431                             | 0,0400 | 0,9169 | 6,1E-05                                   | 4,66E-06 | 3,2E-05 |
| 4      | Organik | 0,6461                            | 0,0846 | 0,2693 | 0,6425                             | 0,0910 | 0,2664 | 1,3E-05                                   | 4,21E-05 | 8,4E-06 |
|        | Aqueous | 0,0376                            | 0,0371 | 0,9253 | 0,0417                             | 0,0327 | 0,9256 | 1,6E-05                                   | 1,94E-05 | 1,2E-07 |
| 5      | Organik | 0,7843                            | 0,0407 | 0,1750 | 0,7865                             | 0,0369 | 0,1766 | 4,5E-06                                   | 1,4E-05  | 2,7E-06 |
|        | Aqueous | 0,0290                            | 0,0090 | 0,9619 | 0,0237                             | 0,0099 | 0,9664 | 2,9E-05                                   | 7,82E-07 | 2E-05   |
| 6      | Organik | 0,7094                            | 0,0648 | 0,2259 | 0,7097                             | 0,0650 | 0,2254 | 1,2E-07                                   | 2,57E-08 | 2,6E-07 |
|        | Aqueous | 0,0410                            | 0,0229 | 0,9361 | 0,0340                             | 0,0219 | 0,9441 | 5E-05                                     | 9,68E-07 | 6,5E-05 |
| 7      | Organik | 0,8242                            | 0,0000 | 0,1758 | 0,8240                             | 0,0000 | 0,1760 | 1,7E-08                                   | 0        | 1,7E-08 |
|        | Aqueous | 0,0136                            | 0,0000 | 0,9864 | 0,0191                             | 0,0000 | 0,9809 | 3,1E-05                                   | 0        | 3,1E-05 |
| OF     |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,002813                                  |          |         |
| % RMSD |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,698                                     |          |         |



5. RMSD UNIQUAC sistem DMC(1) + Iso-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 303.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{\text{exp}}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{\text{cal}}$ ) |        |        | $(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{cal}})^2$ |          |         |
|--------|---------|-----------------------------------|--------|--------|------------------------------------|--------|--------|---|----------|---------|
|        |         | $X_1$                             | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                              | $X_2$  | $X_3$  | DMC                                       | ISO      | AIR     |
| 1      | Organik | 0,0000                            | 0,5427 | 0,4573 | 0,0000                             | 0,5428 | 0,4572 | 1E-10                                     | 1,88E-10 | 1,4E-11 |
|        | Aqueous | 0,0000                            | 0,0126 | 0,9874 | 0,0000                             | 0,0123 | 0,9877 | 1E-10                                     | 1,35E-07 | 1,4E-07 |
| 2      | Organik | 0,1969                            | 0,3039 | 0,4993 | 0,1984                             | 0,3026 | 0,4990 | 2,4E-06                                   | 1,7E-06  | 5,9E-08 |
|        | Aqueous | 0,0093                            | 0,0081 | 0,9826 | 0,0084                             | 0,0080 | 0,9835 | 7,4E-07                                   | 8,77E-09 | 9,1E-07 |
| 3      | Organik | 0,2311                            | 0,2832 | 0,4857 | 0,2163                             | 0,2964 | 0,4873 | 0,00022                                   | 0,000175 | 2,5E-06 |
|        | Aqueous | 0,0082                            | 0,0071 | 0,9848 | 0,0079                             | 0,0075 | 0,9846 | 6E-08                                     | 2,28E-07 | 5,4E-08 |
| 4      | Organik | 0,2827                            | 0,2433 | 0,4740 | 0,2854                             | 0,2405 | 0,4741 | 7E-06                                     | 8,02E-06 | 3,2E-08 |
|        | Aqueous | 0,0078                            | 0,0061 | 0,9861 | 0,0088                             | 0,0061 | 0,9850 | 1,1E-06                                   | 1,57E-10 | 1,1E-06 |
| 5      | Organik | 0,4041                            | 0,1871 | 0,4089 | 0,4034                             | 0,1880 | 0,4086 | 4,2E-07                                   | 8,09E-07 | 6,3E-08 |
|        | Aqueous | 0,0120                            | 0,0057 | 0,9823 | 0,0100                             | 0,0055 | 0,9844 | 4E-06                                     | 2,72E-08 | 4,7E-06 |
| 6      | Organik | 0,5673                            | 0,1389 | 0,2938 | 0,5853                             | 0,1102 | 0,3046 | 0,00032                                   | 0,000826 | 0,00012 |
|        | Aqueous | 0,0067                            | 0,0038 | 0,9894 | 0,0094                             | 0,0032 | 0,9874 | 7,3E-06                                   | 4,6E-07  | 4,1E-06 |
| 7      | Organik | 0,8541                            | 0,0000 | 0,1459 | 0,8542                             | 0,0000 | 0,1458 | 1,5E-09                                   | 1E-10    | 8E-10   |
|        | Aqueous | 0,0141                            | 0,0000 | 0,9859 | 0,0117                             | 0,0000 | 0,9883 | 5,8E-06                                   | 1E-10    | 5,8E-06 |
| 8      | Organik | 0,0727                            | 0,4369 | 0,4904 | 0,0708                             | 0,4381 | 0,4911 | 3,4E-06                                   | 1,28E-06 | 4,9E-07 |
|        | Aqueous | 0,0039                            | 0,0116 | 0,9845 | 0,0041                             | 0,0107 | 0,9851 | 6,8E-08                                   | 7,41E-07 | 3,6E-07 |
| OF     |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,000725                                  |          |         |

6. RMSD UNIQUAC sistem DMC(1) + Iso-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 313.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{exp}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{cal}$ ) |        |        | $(X_i^{exp}-X_i^{cal})^2$ |          |         |
|--------|---------|----------------------------|--------|--------|-----------------------------|--------|--------|---------------------------|----------|---------|
|        |         | $X_1$                      | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                       | $X_2$  | $X_3$  | DMC                       | ISO      | AIR     |
| 1      | Organik | 0,8242                     | 0,0000 | 0,1758 | 0,8276                      | 0,0000 | 0,1915 | 1,2E-05                   | 0        | 0,00025 |
|        | Aqueous | 0,0136                     | 0,0001 | 0,9863 | 0,0142                      | 0,0000 | 0,9858 | 3,1E-07                   | 1E-08    | 2,1E-07 |
| 2      | Organik | 0,5392                     | 0,1022 | 0,3586 | 0,5398                      | 0,1013 | 0,3589 | 4,1E-07                   | 8,76E-07 | 9E-08   |
|        | Aqueous | 0,0144                     | 0,0037 | 0,9819 | 0,0119                      | 0,0040 | 0,9841 | 6E-06                     | 9,97E-08 | 4,6E-06 |
| 3      | Organik | 0,3890                     | 0,1564 | 0,4546 | 0,3865                      | 0,1597 | 0,4538 | 6,4E-06                   | 1,09E-05 | 6E-07   |
|        | Aqueous | 0,0077                     | 0,0058 | 0,9865 | 0,0095                      | 0,0053 | 0,9853 | 3,1E-06                   | 3,05E-07 | 1,5E-06 |
| 4      | Organik | 0,2662                     | 0,2215 | 0,5123 | 0,2652                      | 0,2226 | 0,5122 | 1,1E-06                   | 1,23E-06 | 4,8E-09 |
|        | Aqueous | 0,0085                     | 0,0069 | 0,9846 | 0,0082                      | 0,0071 | 0,9847 | 8,3E-08                   | 4,14E-08 | 7,2E-09 |
| 5      | Organik | 0,2270                     | 0,2467 | 0,5264 | 0,2366                      | 0,2371 | 0,5263 | 9,3E-05                   | 9,16E-05 | 3E-09   |
|        | Aqueous | 0,0081                     | 0,0079 | 0,9840 | 0,0079                      | 0,0075 | 0,9845 | 3,1E-08                   | 1,44E-07 | 3,1E-07 |
| 6      | Organik | 0,1914                     | 0,2681 | 0,5405 | 0,1948                      | 0,2650 | 0,5402 | 1,2E-05                   | 9,68E-06 | 1,1E-07 |
|        | Aqueous | 0,0065                     | 0,0081 | 0,9854 | 0,0068                      | 0,0081 | 0,9851 | 1,2E-07                   | 1,33E-09 | 9,7E-08 |
| 7      | Organik | 0,0000                     | 0,5254 | 0,4746 | 0,0000                      | 0,5375 | 0,4625 | 0                         | 0,000147 | 0,00015 |
|        | Aqueous | 0,0000                     | 0,0153 | 0,9847 | 0,0000                      | 0,0135 | 0,9865 | 0                         | 3,38E-06 | 3,4E-06 |
| 8      | Organik | 0,0571                     | 0,4456 | 0,4974 | 0,0549                      | 0,4328 | 0,5123 | 5E-06                     | 0,000162 | 0,00022 |

|               |        |        |        |        |        |        |         |          |         |
|---------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|----------|---------|
| Aqueous       | 0,0044 | 0,0132 | 0,9823 | 0,0023 | 0,0118 | 0,9859 | 4,6E-06 | 1,99E-06 | 1,3E-05 |
| <b>OF</b>     |        |        |        |        |        |        |         | 0,00328  |         |
| <b>% RMSD</b> |        |        |        |        |        |        |         | 0,645    |         |

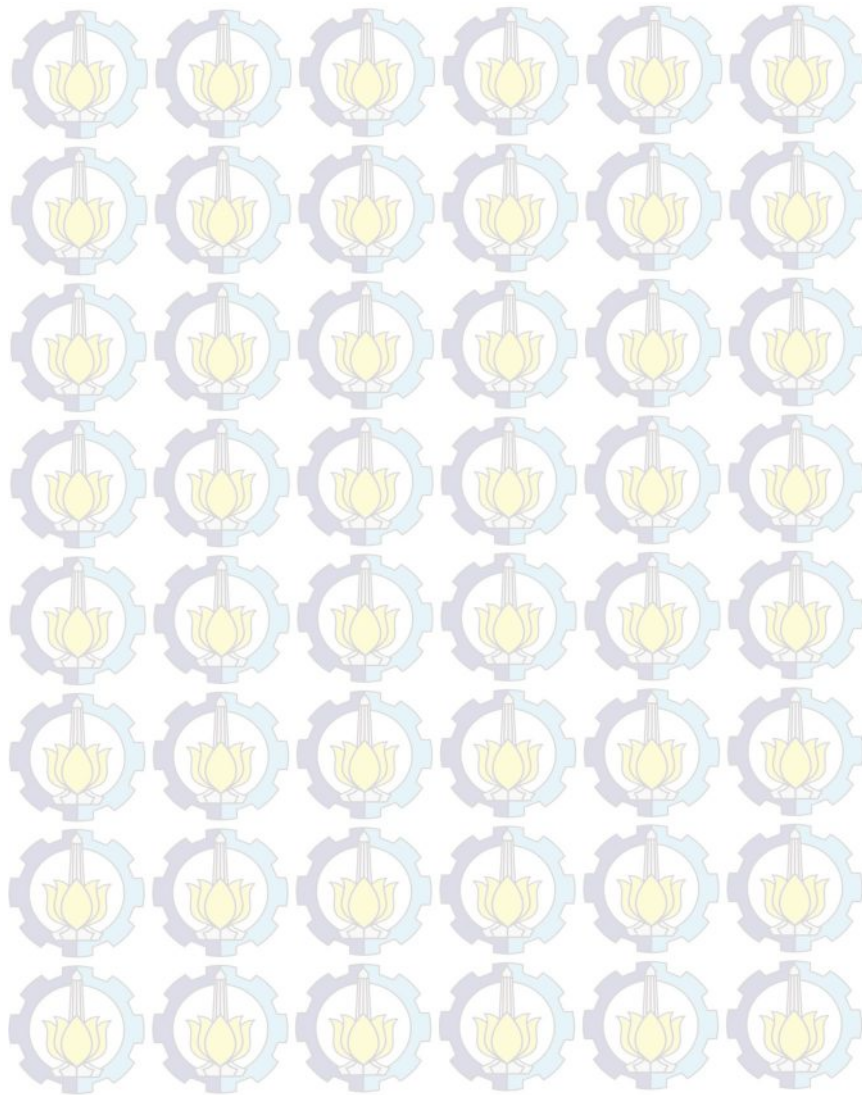
7. RMSD UNIQUAC sistem DMC(1) + Tert-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 303.15 K

| Sampel    | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{exp}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{cal}$ ) |        |        | $(X_i^{exp} - X_i^{cal})^2$ |          |         |
|-----------|---------|----------------------------|--------|--------|-----------------------------|--------|--------|-----------------------------|----------|---------|
|           |         | $X_1$                      | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                       | $X_2$  | $X_3$  | DMC                         | TERT     | AIR     |
| 1         | Organik | 0,7093                     | 0,0701 | 0,2205 | 0,7114                      | 0,0668 | 0,2218 | 4,1E-06                     | 1,11E-05 | 1,7E-06 |
|           | Aqueous | 0,0293                     | 0,0138 | 0,9569 | 0,0261                      | 0,0123 | 0,9615 | 1E-05                       | 2,09E-06 | 2,1E-05 |
| 2         | Organik | 0,6842                     | 0,0794 | 0,2364 | 0,6834                      | 0,0814 | 0,2352 | 6,6E-07                     | 4,02E-06 | 1,4E-06 |
|           | Aqueous | 0,0443                     | 0,0245 | 0,9312 | 0,0424                      | 0,0210 | 0,9366 | 3,7E-06                     | 1,22E-05 | 2,9E-05 |
| 3         | Organik | 0,6516                     | 0,0946 | 0,2538 | 0,6484                      | 0,1007 | 0,2510 | 1E-05                       | 3,7E-05  | 8,2E-06 |
|           | Aqueous | 0,0504                     | 0,0309 | 0,9187 | 0,0482                      | 0,0324 | 0,9193 | 4,6E-06                     | 2,34E-06 | 3,8E-07 |
| 4         | Organik | 0,5355                     | 0,1121 | 0,3524 | 0,5336                      | 0,1149 | 0,3514 | 3,4E-06                     | 8,03E-06 | 9,9E-07 |
|           | Aqueous | 0,0538                     | 0,0461 | 0,9001 | 0,0575                      | 0,0429 | 0,8996 | 1,4E-05                     | 1,05E-05 | 2,1E-07 |
| 5         | Organik | 0,3251                     | 0,1360 | 0,5389 | 0,3292                      | 0,1313 | 0,5395 | 1,7E-05                     | 2,2E-05  | 3,3E-07 |
|           | Aqueous | 0,0986                     | 0,0750 | 0,8264 | 0,0833                      | 0,0896 | 0,8271 | 0,00023                     | 0,000211 | 5,4E-07 |
| 6         | Organik | 0,7756                     | 0,0517 | 0,1726 | 0,7753                      | 0,0522 | 0,1725 | 1E-07                       | 1,78E-07 | 1,1E-08 |
|           | Aqueous | 0,0141                     | 0,0050 | 0,9809 | 0,0170                      | 0,0059 | 0,9771 | 8,4E-06                     | 8,87E-07 | 1,5E-05 |
| 7         | Organik | 0,8548                     | 0,0000 | 0,1452 | 0,8547                      | 0,0000 | 0,1453 | 8,9E-09                     | 0        | 8,9E-09 |
|           | Aqueous | 0,0141                     | 0,0000 | 0,9859 | 0,0185                      | 0,0000 | 0,9815 | 1,9E-05                     | 0        | 1,9E-05 |
| <b>OF</b> |         |                            |        |        |                             |        |        | 0,000965                    |          |         |

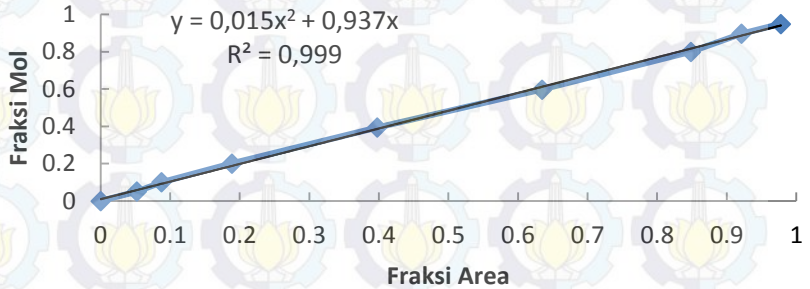


8. RMSD UNIQUAC sistem DMC(1) + Tert-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 313.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{\text{exp}}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{\text{cal}}$ ) |        |        | $(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{cal}})^2$ |          |         |
|--------|---------|-----------------------------------|--------|--------|------------------------------------|--------|--------|---|----------|---------|
|        |         | $X_1$                             | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                              | $X_2$  | $X_3$  | DMC                                       | TERT     | AIR     |
| 1      | Organik | 0,1979                            | 0,1068 | 0,6953 | 0,1918                             | 0,1052 | 0,7030 | 3,7E-05                                   | 2,5E-06  | 5,8E-05 |
|        | Aqueous | 0,0570                            | 0,0439 | 0,8991 | 0,0680                             | 0,0493 | 0,8827 | 0,00012                                   | 2,83E-05 | 0,00027 |
| 2      | Organik | 0,4995                            | 0,1202 | 0,3803 | 0,4989                             | 0,1158 | 0,3853 | 3,7E-07                                   | 1,89E-05 | 2,5E-05 |
|        | Aqueous | 0,0291                            | 0,0289 | 0,9420 | 0,0417                             | 0,0296 | 0,9287 | 0,00016                                   | 4,47E-07 | 0,00018 |
| 3      | Organik | 0,6168                            | 0,0955 | 0,2877 | 0,6160                             | 0,0949 | 0,2890 | 5,8E-07                                   | 3,04E-07 | 1,7E-06 |
|        | Aqueous | 0,0287                            | 0,0228 | 0,9514 | 0,0319                             | 0,0232 | 0,9448 | 1,1E-05                                   | 1,7E-07  | 4,4E-05 |
| 4      | Organik | 0,6461                            | 0,0846 | 0,2693 | 0,6484                             | 0,0824 | 0,2692 | 5,4E-06                                   | 4,59E-06 | 3,5E-08 |
|        | Aqueous | 0,0355                            | 0,0199 | 0,9417 | 0,0305                             | 0,0205 | 0,9490 | 2,5E-05                                   | 3,89E-07 | 5,3E-05 |
| 5      | Organik | 0,7667                            | 0,0430 | 0,1903 | 0,7615                             | 0,0581 | 0,1805 | 2,8E-05                                   | 0,000226 | 9,5E-05 |
|        | Aqueous | 0,0289                            | 0,0151 | 0,9560 | 0,0214                             | 0,0145 | 0,9641 | 5,6E-05                                   | 3,76E-07 | 6,5E-05 |
| 6      | Organik | 0,7094                            | 0,0648 | 0,2259 | 0,7195                             | 0,0468 | 0,2337 | 0,0001                                    | 0,000324 | 6,2E-05 |
|        | Aqueous | 0,0282                            | 0,0148 | 0,9570 | 0,0234                             | 0,0106 | 0,9659 | 2,2E-05                                   | 1,74E-05 | 7,9E-05 |
| 7      | Organik | 0,8242                            | 0,0000 | 0,1758 | 0,8240                             | 0,0000 | 0,1760 | 2,7E-08                                   | 0        | 2,7E-08 |
|        | Aqueous | 0,0136                            | 0,0000 | 0,9864 | 0,0152                             | 0,0000 | 0,9848 | 2,5E-06                                   | 0        | 2,5E-06 |
| OF     |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,001699                                  |          |         |
| % RMSD |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,563                                     |          |         |

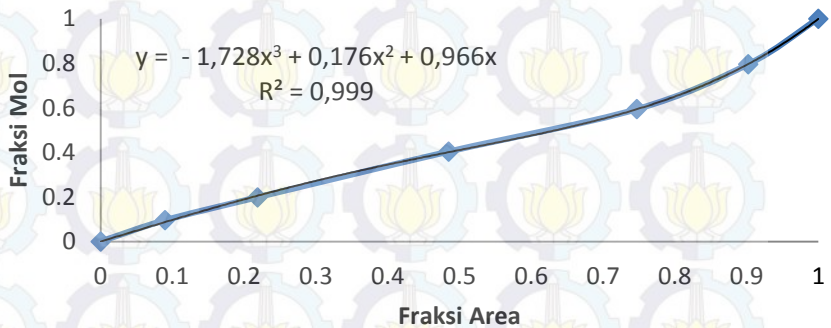


### DMC (+Tert)



9. Kurva kalibrasi DMC + Tert-Butanol

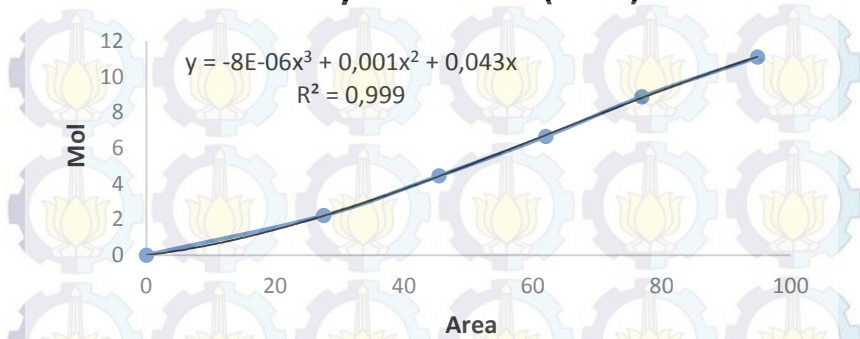
### Air+ (Tert)



10. kurva kalibrasi Air + Tert-Butanol

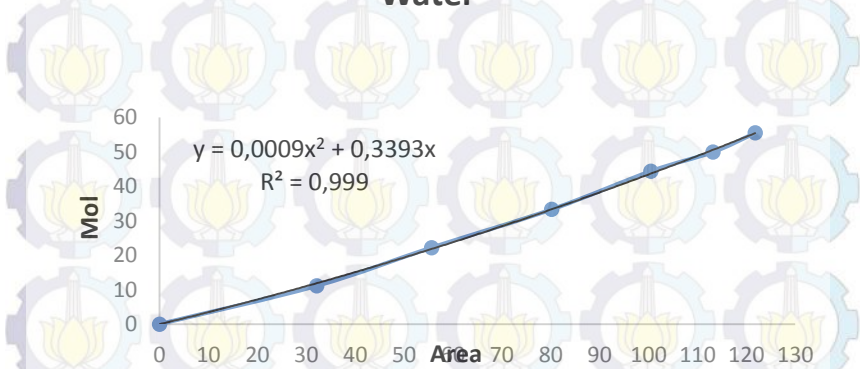


## Dimethyl Carbonate (DMC)



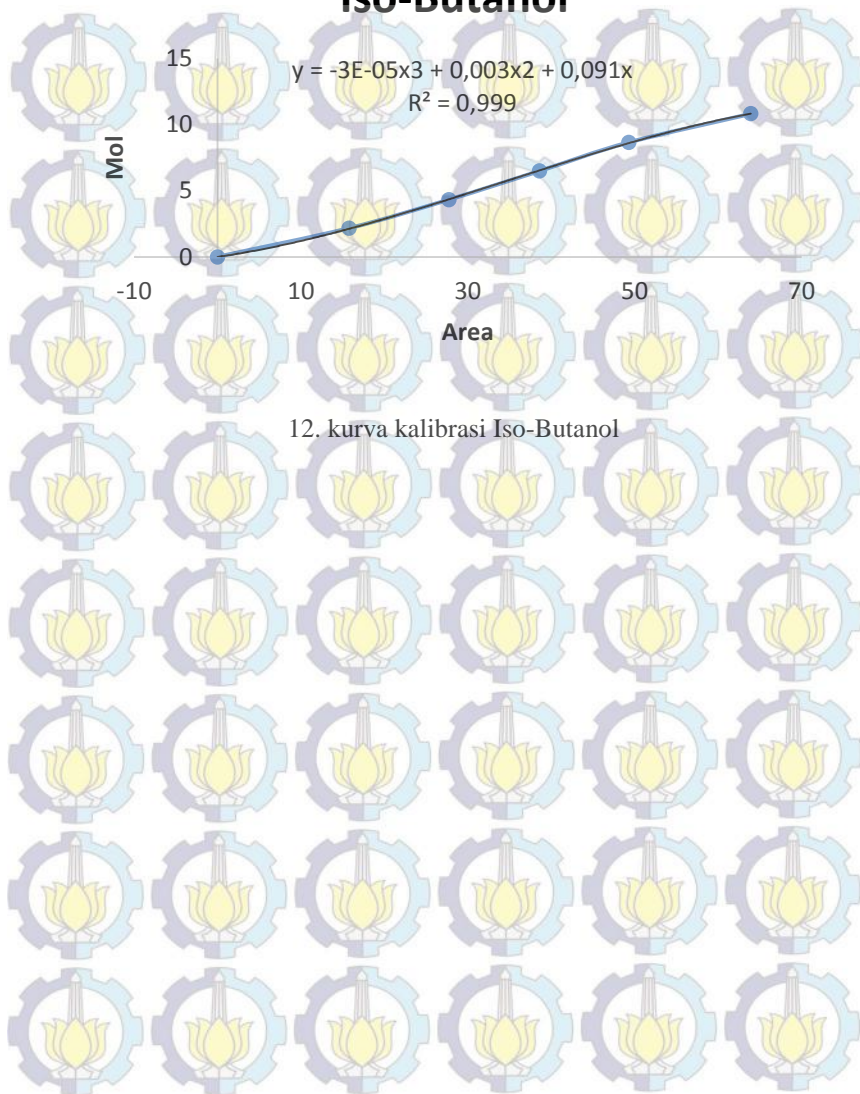
11. kurva kalibrasi Dimethyl Carbonate (DMC)

## Water

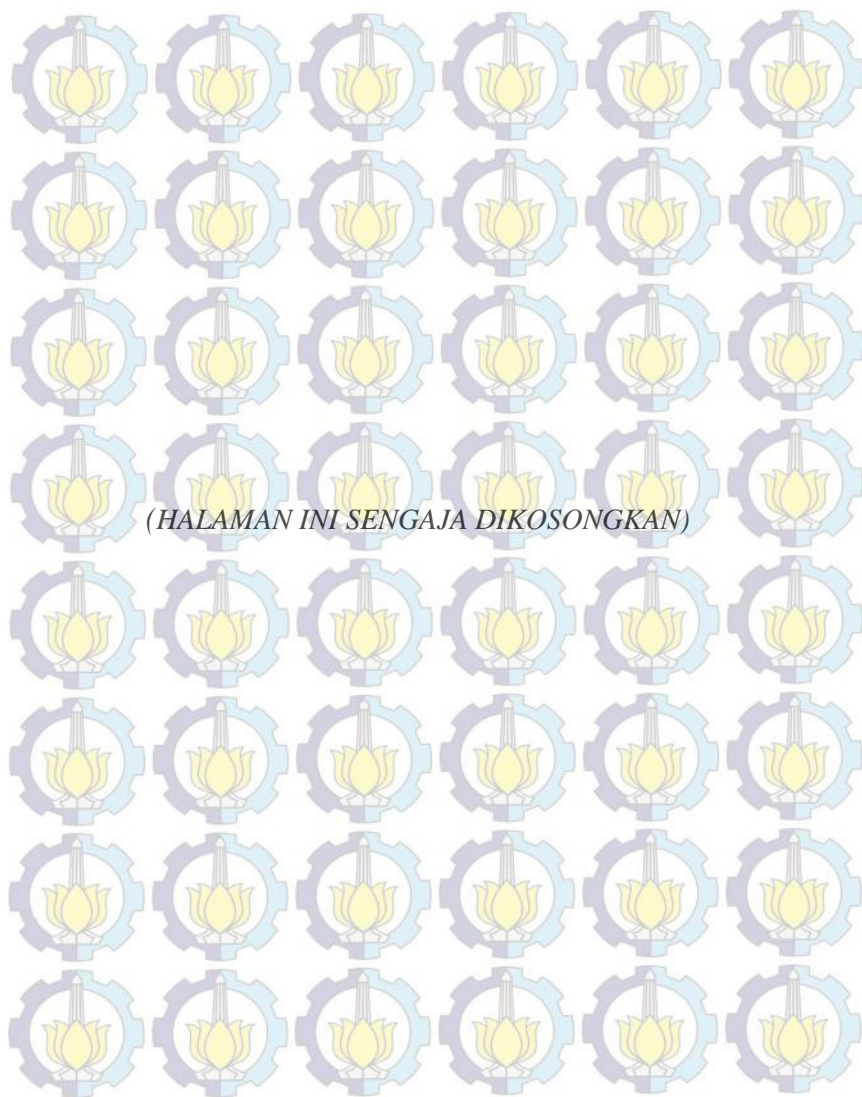


12. kurva kalibrasi Air

## Iso-Butanol



12. kurva kalibrasi Iso-Butanol



*(HALAMAN INI SENGAJA DIKOSONGKAN)*



**KESETIMBANGAN CAIR-CAIR SISTEM TERNER  
DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + AIR DAN  
DIMETHYL CARBONATE + TERT-BUTANOL + AIR  
PADA TEMPERATUR 303,15 DAN 313,15 K**

**Nama** : Rizal Wahyu Abdillah (2311 100 031)  
Abdul Hadi Albar (2311 100 186)  
**Jurusan** : Teknik Kimia ITS  
**Pembimbing** : Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng  
Dr. Ir. Kuswandi, DEA

**Abstrak**

*Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan cair-cair sistem terner DMC + Isobutanol + air dan DMC + Tert-butanol + air pada tekanan atmosfer pada suhu 303,15 dan 313,15 K. Peralatan yang digunakan dalam eksperimen ini adalah equilibrium cell 50 mL yang dilengkapi dengan jaket pemanas, Detektor Temperatur Autronics RTD Pt100 dan kontroler PID ONLY AT-502 untuk mengontrol temperatur kesetimbangan dengan akurasi  $\pm 0,1$  K. Temperatur dijaga dengan air sirkulasi yang mengalir dari waterbath ke equilibrium cell. Eksperimen dimulai dengan memasukkan 30 mL larutan terner dengan komposisi yang telah ditentukan kedalam equilibrium cell dan diaduk menggunakan magnetic stirrer selama 4 jam serta dibiarkan agar fase organik dan fase aqueous terpisah secara sempurna selama 20 jam. Kemudian masing-masing fasa dianalisa menggunakan Shimadzu Gas Chromatography 2010 Plus dengan standart deviasi 0.02% mol. Dari hasil eksperimen didapatkan bahwa kelarutan untuk sistem DMC + Isobutanol + air meningkat seiring dengan meningkatnya suhu. Sedangkan untuk sistem DMC + Tert-Butanol + air kenaikan suhu tidak berpengaruh secara signifikan pada kelarutan. Hasil eksperimen dikorelasikan dengan baik dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC dengan nilai Root Mean Square Deviation masing-masing sebesar 0.7 dan.*

**Kata kunci:** Kesetimbangan cair-cair, DMC, Isobutanol, Tert-butanol, Air, NRTL, UNIQUAC



# LIQUID-LIQUID EQUILIBRIUM OF THE TERNARY SYSTEM DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + WATER AND DIMETHYL CARBONATE +TERT- BUTANOL + WATER AT 303.15 AND 313.15 K

**Name** : Rizal Wahyu Abdillah (2311 100 031)  
Abdul Hadi Albar (2311 100 186)  
**Department** : Chemical Engineering, ITS  
**Advisor** : Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng  
Dr. Ir. Kuswandi, DEA

## Abstract

*The objective of this study was to determine experimentally ternary liquid-liquid equilibrium data for DMC + Isobutanol + water and DMC + Tert-butanol + water systems at atmospheric pressure and temperatures of 303.15 and 313.15 K. The main experimental apparatus are 50 ml equilibrium cell equipped with heating jacket, Autonics RTD Pt100 temperature detector and PID controller ANLY AT-502 to control equilibrium temperature with accuracy of  $\pm 0.1$  K. Temperature was controlled by circulating water from waterbath to equilibrium cell. The experiment was started by adding certain composition of 30 ml ternary mixture into equilibrium cell and stirred by magnetic stirrer for 4 hours and to be allowed organic and aqueous phases separated well at equilibrium condition for 20 hours. The composition of each phase were analyzed using Shimadzu Gas Chromatography 2010 Plus with standard deviation of 0.02 % mol. From the experiments result was found that the solubility increase with increasing temperature studied for DMC + Isobutanol + water system. However for DMC + Tert-butanol + water system temperature has no significant effect on solubility. The experimental data were correlated well using NRTL and UNIQUAC equations with 0.7 and 0.6 average Root Mean Square Deviation, respectively.*

**Keywords:** Liquid-liquid equilibrium, DMC, Isobutanol, Tert-Butanol, Water, NRTL, UNIQUAC.





## KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, puji syukur kehadiran Allah SWT. yang selalu melimpahkan rahmat dan karunia-Nya sehingga kami dapat menyelesaikan laporan skripsi yang berjudul **“KESETIMBANGAN CAIR-CAIR SISTEM TERNER DIMETHYL CARBONATE + ISOBUTANOL + AIR DAN DIMETHYL CARBONATE + TERT-BUTANOL + AIR PADA TEMPERATUR 303,15 DAN 313,15 K”** tepat pada waktunya. Tugas akhir ini disusun sebagai salah satu syarat untuk menyelesaikan studi program Strata-I di Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember, Surabaya.

Penulis menyadari dalam penyusunan Skripsi ini tidak akan selesai tanpa bantuan dari berbagai pihak. Oleh karena itu pada kesempatan ini kami ingin mengucapkan terima kasih kepada :

1. Bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng, selaku Kepala Laboratorium Termodinamika Teknik Kimia sekaligus Dosen Pembimbing Utama atas semua bimbingan dan motivasi yang diberikan.
2. Bapak Dr. Ir. Kuswandi, DEA., selaku Dosen Pembimbing kedua atas bimbingan, saran dan motivasi yang diberikan.
3. Bapak Prof. Dr. Ir. Tri Widjaja, M.Eng. selaku Ketua Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember Surabaya
4. Bapak dan Ibu Dosen Jurusan Teknik Kimia FTI – ITS yang telah memberikan ilmunya kepada penulis.
5. Seluruh civitas akademika Jurusan Teknik Kimia FTI - ITS yang telah memberikan dukungan moril kepada penulis
6. Orang tua serta saudara-saudara kami, atas do'a, bimbingan, perhatian, serta kasih sayang yang selalu tercurah selama ini.

7. Keluarga besar Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS), khususnya keluarga angkatan 2011 dan teman-teman seangkatan di Laboratorium Termodinamika Teknik Kimia, Jurusan Teknik Kimia, FTI-ITS atas semua dukungan, semangat, serta kerjasamanya.

Kami menyadari laporan skripsi ini tidak luput dari berbagai kekurangan, untuk itu penulis mengharapkan saran dan kritik demi kesempurnaan dan perbaikannya. Akhirnya laporan skripsi ini dapat memberikan sumbangan bagi pembaca.

Surabaya, 11 Juni 2015

Penyusun



## DAFTAR ISI

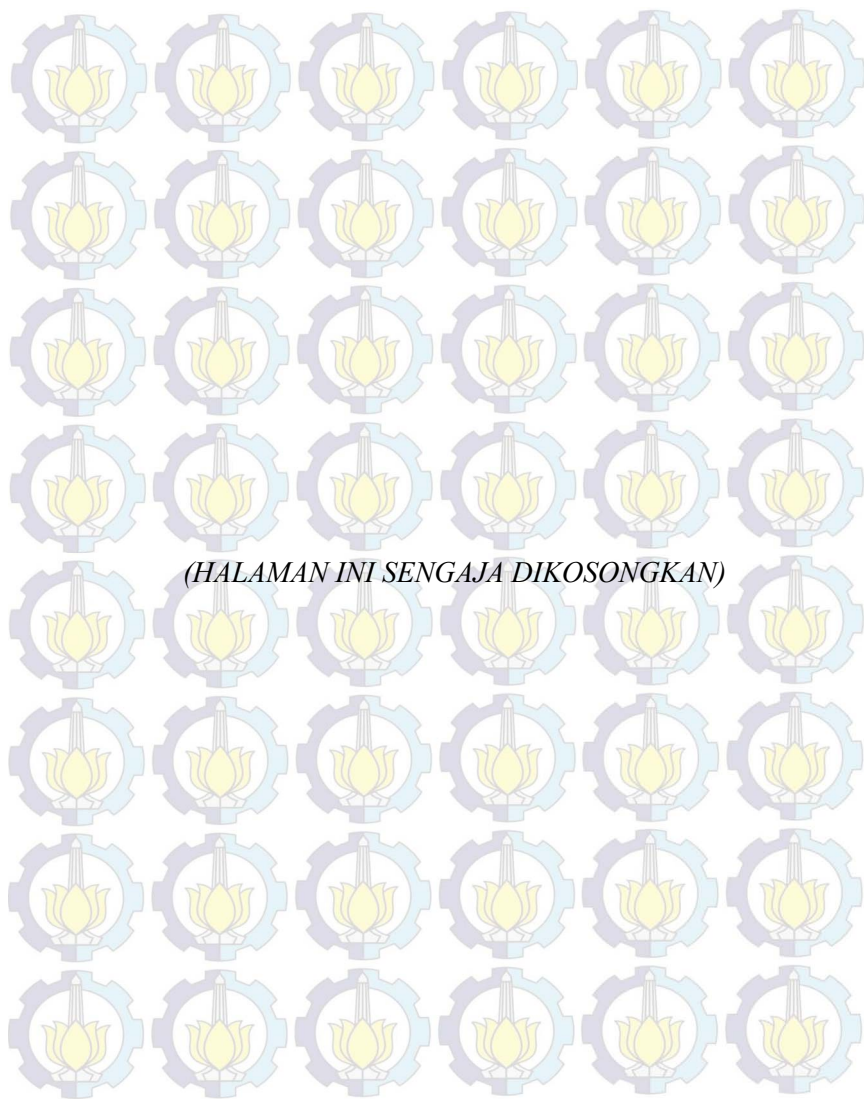
|  |      |
|--|------|
| HALAMAN JUDUL  | i    |
| HALAMAN PENGESAHAN                                       | v    |
| ABSTRAK  | vii  |
| KATA PENGANTAR   | xi   |
| DAFTAR ISI   | xiii |
| DAFTAR TABEL   | xv   |
| DAFTAR GAMBAR  | xvii |
| <b>BAB I PENDAHULUAN</b>                                 |      |
| 1.1 Latar Belakang                                       | 1    |
| 1.2 Perumusan Masalah                                    | 4    |
| 1.3 Tujuan Penelitian                                    | 5    |
| 1.4 Manfaat Penelitian                                   | 6    |
| <b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b>                           |      |
| 2.1 Tinjauan Penelitian                                  | 7    |
| 2.2 Isobutanol   | 9    |
| 2.3 Tert-butanol   | 9    |
| 2.4 Dimethyl Carbonate (DMC)                             | 10   |
| 2.5 Kesetimbangan cair-cair (LLE)                        | 10   |
| 2.6 Korelasi Koefisien Aktifitas Fase Cair               | 12   |
| 2.6.1 Model Persamaan NRTL (Non Random Two Liquid)       | 12   |
| 2.6.2 Model Persamaan UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical) | 14   |
| 2.7 Perhitungan Deviasi Hasil Eksperimen dan Prediksi    | 15   |
| 2.8 Korelasi Bachman-Brown                               | 16   |
| <b>BAB III METODOLOGI PENELITIAN</b>                     |      |
| 3.1 Peralatan Eksperimen                                 | 17   |
| 3.2 Bahan Yang Digunakan                                 | 18   |
| 3.3 Scope Penelitian                                     | 18   |

|        |  |    |
|--------|--|----|
| 3.4    | Prosedur Eksperimen  | 19 |
| 3.4.1  | Eksperimen   | 19 |
| 3.4.2  | Analisa  | 19 |
| 3.5    | Diagram Alir Metodologi Penelitian   | 20 |
| 3.5.1  | Diagram Alir Metode Penelitian   | 20 |
| 3.5.2  | Diagram Blok Perhitungan Koefisien<br>Aktifitas dan <i>Fitting</i> Parameter | 20 |
| BAB IV | HASIL DAN PEMBAHASAN   |    |
| 4.1    | Hasil dan Pembahasan Eksperimen  | 25 |
| 4.2    | Hasil Prediksi Kesetimbangan   | 32 |
| 4.2.1  | Penentuan Paramener  | 32 |
| 4.2.2  | Korelasi dan Data Kesetimbangan  | 34 |
| BAB V  | KESIMPULAN   | 35 |
|        | DAFTAR PUSTAKA   | 37 |
|        | DAFTAR NOTASI  | 41 |
|        | APPENDIKS  | 43 |
|        | LAMPIRAN   | 57 |

## DAFTAR TABEL

|           |  |    |
|-----------|--|----|
| Tabel 1.1 | Nilai RON untuk Isomer Butanol   | 4  |
| Tabel 2.1 | Properti Isobutanol  | 9  |
| Tabel 2.2 | Properti Tert-butanol  | 9  |
| Tabel 2.3 | Properti Dimethyl Carbonate  | 10 |
| Tabel 4.1 | Data Eksperimen Keseimbangan Cair-Cair<br>Sistem Dimethyl Carbonate(1) +<br>Isobutanol(2) + air (3)    | 27 |
| Tabel 4.2 | Data Eksperimen Keseimbangan Cair-Cair<br>Sistem Dimethyl Carbonate(1) + Tert-<br>butanol(2) + air (3) | 28 |
| Tabel 4.3 | Bachman-Brown parameter  | 29 |
| Tabel 4.4 | UNIQUAC Parameter Luas dan Volume  | 32 |
| Tabel 4.5 | Hasil Parameter Persamaan NRTL   | 33 |
| Tabel 4.6 | Hasil Parameter Persamaan UNIQUAC  | 33 |





## DAFTAR NOTASI

|                    |   |
|--------------------|---|
| $a_{i,j}$          | = Parameter aktivitas campuran biner (j/mol)  |
| $f_i$              | = Fugasitas komponen murni i  |
| G, g               | = Energi Gibbs molar  |
| $G^E$              | = Energi Gibbs excess   |
| j                  | = Parameter Persamaan UNIQUAC   |
| K                  | = Konstanta kesetimbangan   |
| l                  | = Parameter Persamaan UNIQUAC   |
| n                  | = Jumlah mol  |
| P                  | = Tekanan absolut (kPa)   |
| $p_i^{\text{sat}}$ | = Tekanan uap jenuh komponen I (kPa)  |
| q                  | = Luas permukaan molekular pada persamaan UNIQUAC                                     |
| R                  | = Konstanta gas ideal ( $8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ) |
| r                  | = Volume molekular pada persamaan UNIQUAC   |
| T                  | = Temperatur (K)  |
| $V_i$              | = Volum molar komponen I ( $\text{cm}^3/\text{mol}$ )                                 |
| $x_{i,j}$          | = Fraksi mol komponen fase liquida pada kesetimbangan                                 |
| z                  | = Fraksi mol <i>overall</i> komponen  |
| RMSD               | = <i>Root Mean Square Deviation</i>   |

## Huruf Greek

|          |   |
|----------|---|
| $\alpha$ | = <i>Non-Randomness Factor</i> , Parameter untuk persamaan NRTL |
| $\beta$  | = Split Fraction  |
| $\gamma$ | = Koefisien aktivitas   |
| $\theta$ | = <i>Area fraction</i>  |
| $\phi$   | = Koefisien fugasitas   |
| $\Sigma$ | = Notasi Penjumlahan  |
| $\tau$   | = Konstanta empiris untuk persamaan NRTL dan UNIQUAC            |

## Superscript

|   |                          |
|---|--------------------------|
| C | = <i>Combinatorial</i>   |
| E | = Ekses                  |
| L | = <i>Liquida</i>         |
| S | = <i>Saturated</i>       |
| V | = Fase uap               |
| R | = Residual               |
| 0 | = Keadaan standar        |
| - | = Properti parsial       |
| ^ | = Properti dalam larutan |

## Subscript

|            |                                 |
|------------|---------------------------------|
| i, j, k, l | = Komponen dalam campuran       |
| e          | = Kondisi kesetimbangan         |
| m          | = Pencampuran ( <i>mixing</i> ) |



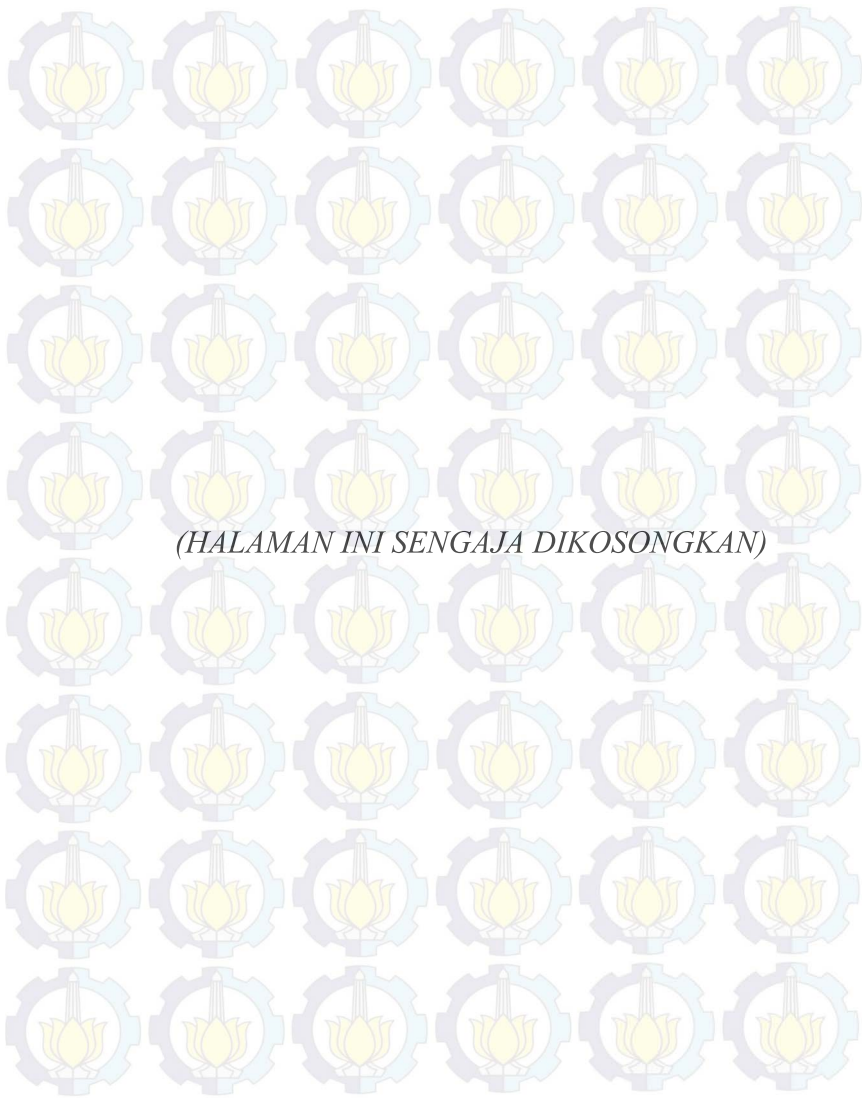
## BIODATA PENULIS



**Rizal Wahyu Abdillah** lahir pada tanggal 1 Juli 1992 di kota Sidoarjo-Jawa Timur. Penulis menempuh pendidikan formal di TK Nurur Rohmah Sidoarjo, melanjutkan di MINurur Rohmah Sidoarjo, kemudian menempuh pendidikan menengahnya di SMPN 1 Sidoarjo dan SMAN 2 Sidoarjo. Dan pada tahun 2011, penulis mulai melanjutkan pendidikan S1 di Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS),

Fakultas Teknologi Industri, Program Studi Teknik Kimia, sampai dengan terselesaikannya buku ini. Banyak pengalaman yang penulis dapatkan semasa kuliah, diantaranya penulis aktif dalam organisasi Badan Eksekutif Mahasiswa-FTI (BEM FTI) ITS bidang *Keprofesian dan Keilmiahan*. Selain itu penulis juga menjadi Dewan Perwakilan Mahasiswa FTI-ITS, dan banyak lagi pengalamannya semasa kuliah, namun tidak bisa dituliskan semuanya.

Penulis menjalani kerja praktek di PT BADAK LNG Bontang Kalimantan-Timur. Dan pada akhir studinya, Laboratorium Termodinamika Teknik Kimia dipilih untuk pengerjaan tugas akhir. Penulis menyelesaikan tugas Pra-Desain Pabrik Pembangkit Listrik Tenaga Panas Bumi Kapasitas 130 MW di Kepahiang-Bengkulu dan skripsi yang berjudul “Keseimbangan Cair-Cair Sistem Ternern Dimethyl Carbonate + Isobutanol + Air dan Dimethyl Carbonate + Tert-butanol + Air pada Temperatur 303,15 dan 313,15 K” dibawah bimbingan Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng dan Dr. Ir. Kuswandi, DEA. Apabila ada kritik dan saran yang membangun tentang penelitian ini, maka pembaca dapat menghubungi penulis via email : [rizal.wahyu124@gmail.com](mailto:rizal.wahyu124@gmail.com).



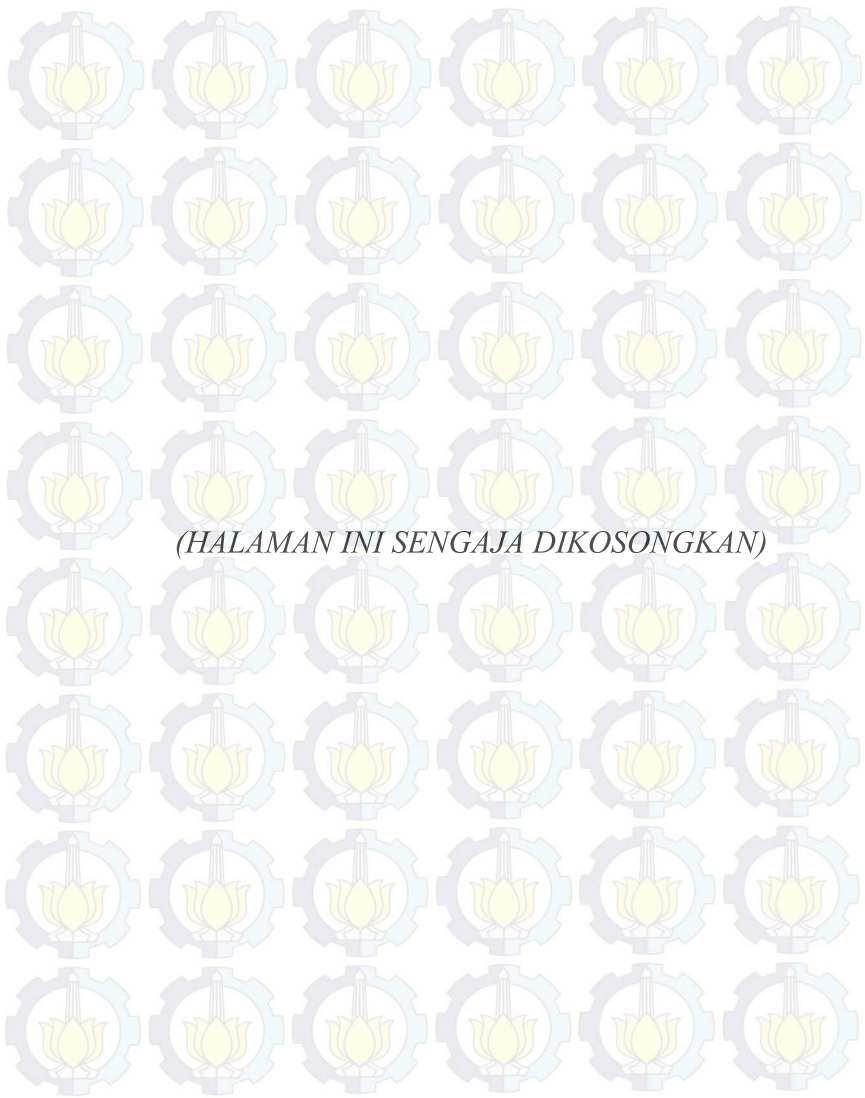
## BIODATA PENULIS



**Abdul Hadi Albar** lahir pada tanggal 30 April 1992 di kota Surabaya-Jawa Timur, merupakan anak ke-3 dari 3 bersaudara. Penulis menempuh pendidikan formal di TK Kurnia Sari Surabaya, melanjutkan di SD Attarbiyah Surabaya, kemudian menempuh pendidikan menengahnya di SMP Negeri 102 Jakarta dan SMA Negeri 28 Jakarta. Dan pada tahun 2011, penulis mulai melanjutkan

pendidikan S1 di Institut Teknologi Sepuluh nopember (ITS), Fakultas Teknologi Industri, Program Studi Teknik Kimia, sampai dengan terselesaikannya buku ini. Banyak pengalaman yang penulis dapatkan semasa kuliah, diantaranya penulis aktif dalam organisasi Himpunan Mahasiswa teknik Kimia (HIMATEKK) ITS dengan jabatan akhir sebagai *Head of Event Management Division* (EMISION) dan banyak lagi pengalamannya semasa kuliah, namun tidak bisa dituliskan semuanya.

Penulis menjalani kerja praktek di PT Badak NGL Bontang. Dan pada akhir studinya, Laboratorium Termodinamika Teknik Kimia dipilih untuk pengerjaan tugas akhir. Penulis menyelesaikan tugas Pra-Desain Pembangkit Listrik Tenaga Panas Bumi 130 MW di Kapahiang-Bengkulu dan skripsi yang berjudul “ Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Ternern Dimethyl Carbonate + Isobutanol + Air dan Dimethyl Carbonate + Tert-Butanol + Air pada Temperatur 303,15 dan 313,15 K” dibawah bimbingan Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng dan Dr.Ir. Kuswandi, DEA Apabila ada kritik dan saran yang membangun tentang penelitian ini, maka pembaca dapat menghubungi penulis via email : [hadialbar28@gmail.com](mailto:hadialbar28@gmail.com).





# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Bahan bakar baik bensin maupun solar saat ini banyak digunakan baik untuk aktifitas transportasi maupun industri. Namun, pembakaran yang kurang sempurna menyebabkan penggunaan bahan bakar menjadi lebih boros dan dapat menghasilkan emisi gas buang yang berbahaya bagi kesehatan dan lingkungan. Diantaranya adalah emisi dari materi partikulat, CO, hidrokarbon, NO<sub>x</sub>, dan SO<sub>2</sub> (Kadarohman, 2003).

Alternatif untuk meningkatkan efisiensi pembakaran bahan bakar dan mengurangi pencemaran adalah mereformulasi bahan bakar dengan zat aditif yang berfungsi untuk memperkaya kandungan oksigen dalam bahan bakar. Song (2001) dan Choi (1999) mengemukakan zat aditif *oxygenate* pada bahan bakar berperan untuk meningkatkan bilangan setana (*cetane number*) serta atom oksigen di dalam bahan bakar yang berperan untuk mengoksidasi jelaga dan gas karbon monoksida (CO) sehingga pembakaran menjadi lebih sempurna.

Senyawa *oxygenate* adalah senyawa organik cair yang dapat dicampur ke dalam bahan bakar untuk menambah kandungan oksigennya, seperti *ditertiarybutyl peroxide* (DTBP), *methyl-tertiary-butyl ether* (MTBE), *tri-propylene glycol methyl ether* (TPGME), dan *di-butyl maleate* (DBM). Senyawa organologam yang sudah digunakan sebagai aditif, misalnya *tetra ethyl lead* (TEL) dan *methyl cyclopentadienyl manganese tricarbonyl* (MMT). Aditif ini akan membuat radikal bebas pada rantai karbon bahan bakar. Dengan adanya radikal bebas, maka akan semakin mudah rantai karbon tersebut untuk membuat cabang baru. Efek dari timbulnya cabang baru adalah meningkatnya nilai oktana/setana dan nilai kalori (Adia, 2008). Namun setelah dipakai beberapa waktu, para peneliti menemukan kelemahan TEL yaitu dapat menimbulkan emisi bahan bakar yang

membahayakan bagi kesehatan manusia. Begitu juga dengan MTBE yang memiliki kelarutan tinggi dalam air, sehingga dapat menimbulkan kerugian bagi manusia. Apabila terjadi kebocoran tangki SPBU maka bensin akan meresap ke dalam tana. Air tanah yang terminum manusia ini berbahaya karena telah tercemari oleh MTBE yang bersifat karsinogenik (zat penyebab kanker) (Torre *et al.*, 2006).

Setelah itu dikembangkan beberapa penelitian mengenai alternatif baru zat aditif bahan bakar yang dapat meningkatkan nilai oktan serta memenuhi standar emisi. Baru-baru ini dimethyl carbonate (DMC) banyak digunakan sebagai aditif dalam bahan bakar, disamping kegunaannya sebagai zat elektrolit untuk baterai lithium dan solvent dalam berbagai industry (Hwang *et al.*, 2012). DMC termasuk sebagai *green chemical*, karena bahan ini tidak beracun, ramah lingkungan dan bisa terurai (*biodegradable*) sehingga pemakaian DMC sebagai zat aditif, solvent dan lainnya tidak akan menyebabkan polusi (Torre *et al.*, 2006). Selain itu DMC juga memiliki kandungan oksigen 3 kali MTBE dan mereduksi emisi hidrokarbon dan CO lebih banyak daripada MTBE (Michael *et al.*, 1996).

Wen *et al.* (2009) membuktikan bahwa performa dan hasil emisi dari campuran bensin-DMC dengan DMC sebesar 5% volume lebih baik daripada campuran bensin-ethanol dengan ethanol sebesar 10% volume. Namun, penambahan aditif yang mengandung oksigen meningkatkan konsumsi dari bahan bakar. Hal ini dikarenakan *heating value* dari bahan bakar campuran lebih rendah daripada bensin murni. Menggunakan bahan bakar yang mempunyai *heating value* yang lebih rendah merubah kondisi operasi dari mesin, seperti rasio kompresi, waktu *ignition* dan sebagainya.

Ada beberapa macam proses reaksi pembentukan DMC dalam skala industri antara lain: (1) Reaksi antara phosgene dengan methanol; (2) Reaksi carbon monoxide dengan methanol dan oksigen (*oxidative carbonylation*); (3) Reaksi ethylene oxide dengan CO<sub>2</sub> membentuk ethylene carbonate kemudian diikuti

dengan pertukaran ester dengan methanol; (4) Reaksi langsung antara carbon dioxide dan methanol (Jun-Chul Choi *et al.*, 2008). Pemisahan adalah aspek yang penting dalam proses produksi DMC dalam rangka pemurnian DMC. Misalnya reaksi *oxidative carbonylation* dengan beberapa macam alkohol, memerlukan pemisahan untuk suatu system ternary yaitu DMC-Alkohol-Air (Michael *et al.*, 1996).

Sebagai zat aditif *oxygenate*, DMC digunakan sebagai single-aditif pada bahan bakar maupun co-aditif dengan simple-alkohol. (Hwang *et al.*, 2012). Beberapa alkohol primer dan eter yang memiliki kelarutan rendah dalam air dan beberapa alkylate bisa menjadi calon aditif baru untuk meningkatkan bilangan oktan. Maka perlu dipelajari pengaruh efek perilaku penambahan dari zat aditif tersebut, terutama penambahan DMC co-aditif dengan beberapa simple-alkohol yaitu kelarutannya terhadap air. Namun hingga saat ini ketersediaan data-data kesetimbangan dan kelarutan untuk DMC dengan campuran alkohol masih terbatas.

Penggunaan alkohol dalam penerapan gasohol (gasolin + alkohol) sangat menentukan karakter dari gasohol tersebut. Semakin panjang rantai karbon dari alkohol tersebut akan meningkatkan nilai dari heating value dari sistem campuran tersebut. Pada umumnya penggunaan gasohol masih menggunakan ethanol sebagai jenis alkohol nya. Namun, penggunaan etanol berakibatkan *fuel consumption* yang tinggi pula yang diakibatkan oleh nilai bakar yang tidak cukup tinggi pada etanol. Penggunaan butanol merupakan salah satu cara mendapatkan gasohol dengan *fuel consumption* yang lebih kecil dikarenakan nilai bakar pada butanol yang lebih tinggi.

Butanol memiliki 4 macam isomer yaitu n-butanol, 2-butanol, iso-butanol dan tert-butanol. Dari tabel 1.1 dibawah ini, tert-butanol dan iso-butanol memiliki nilai setana atau oktan yang paling tinggi di antara yang lain sehingga penggunaan kedua komponen tersebut dalam campuran bahan bakar ( gasolin ) dapat menghasil oktan yang lebih baik.



**Tabel 1.1** Nilai RON untuk isomer butanol (Advance Motor Fuels, 2011)

| Komponen     | RON       |
|--------------|-----------|
| n-Butanol    | 94        |
| 2-Butanol    | 101       |
| Tert-Butanol | 104 - 110 |
| Iso-Butanol  | 113       |

Ketersediaan mengenai data kesetimbangan cair-cair (LLE) sangat dibutuhkan untuk memahami perilaku dan sifat termodinamika dari sistem yang mengandung air, alkohol, dan *oxygenates*. Akhir-akhir ini, penelitian mengenai LLE pada sistem terner yang mengandung DMC sudah dipublikasikan seperti kesetimbangan cair-cair sistem terner DMC + C1-C4 Alkohol + Air pada suhu 298.15 K dan tekanan atmosferik. (Hwang *et al.*, 2011). Selain itu juga sudah pernah dilakukan penelitian kesetimbangan cair-cair sistem terner Air + 1-butanol + DMC/DEC pada suhu 298.15 K. (Chen *et al.*, 2011). Namun untuk penelitian pada suhu 298.15 K sulit diaplikasikan di Indonesia, karena Indonesia berada pada iklim tropis, dimana suhu rata-ratanya berkisar 303.15 K – 313.15 K pada saat musim panas.

Karena suhu mempengaruhi pada daerah kesetimbangan cair-cair, maka penelitian kali ini berfokus suhu yang perilaku kesetimbangan fasa cair-cair untuk sistem dimetil karbonat + Isobutanol + air dan dimetil karbonat + Tert-butanol + air pada temperatur 303.15 K dan 313.15 K. Diharapkan dengan adanya data kesetimbangan ini dapat menjadi dasar pencampuran untuk bahan bakar yang mempunyai performa yang bagus.

## 1.2 Perumusan Masalah

Akhir-akhir ini, penelitian mengenai LLE pada sistem terner yang mengandung DMC dan alkohol sudah dipublikasikan seperti kesetimbangan cair-cair sistem terner DMC + C1-C4



Alkohol + Air pada suhu 298.15 K dan tekanan atmosferik. (Hwang *et al.*, 2011). Selain itu juga sudah pernah dilakukan penelitian kesetimbangan cair-cair sistem terner air + 1-butanol + DMC/DEC pada suhu 298.15 K. (Chen *et al.*, 2011). Karena Indonesia berada pada iklim tropis, dimana suhu rata-ratanya berkisar 303.15 K – 313.15 K maka dibutuhkan data kesetimbangan pada suhu di atas 298.15 K.

Di sisi lain methanol dan etanol bersifat korosif sehingga pemakaiannya mulai dikurangi, maka dicobalah butanol sebagai energi alternatif untuk menggantikan etanol sebagai blending dengan DMC. Nilai oktan untuk butanol (103) mirip dengan bensin (90-105) tetapi lebih rendah dari etanol (108,7) maupun metanol (108,6). Butanol sendiri memiliki beberapa keuntungan, yaitu *vapor pressure* yang lebih rendah (1,3 kPa) dibandingkan metanol (12 kPa), etanol (8 kPa) maupun propanol (2 kPa) pada suhu 20°C, dan juga lebih ramah terhadap mesin karena tidak bersifat korosif seperti etanol dan metanol. Kelebihan lain dari butanol adalah bahan baku sintesa butanol yang berasal dari biomassa. Hal ini merupakan peluang butanol untuk dikembangkan dan diproduksi secara massal karena Indonesia kaya akan biomassa.

Berdasarkan uraian di atas, penelitian mengenai kesetimbangan cair-cair sistem terner DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert-butanol + Air pada temperatur 303.15 K dan 313.15 K perlu dilakukan. Diharapkan dengan adanya data kesetimbangan ini dapat menjadi dasar pencampuran untuk bahan bakar yang mempunyai performa yang bagus.

### **1.3 Tujuan Penelitian**

Tujuan dari penelitian ini adalah :

1. Memperoleh data kesetimbangan cair-cair (LLE) sistem terner DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert-butanol + Air pada suhu 303.15 K dan 313.15 K pada tekanan atmosferik.

2. Mengkorelasikan data eksperimen yang didapatkan dengan menggunakan persamaan NRTL dan UNIQUAC.

#### **1.4 Manfaat Penelitian**

Manfaat yang dapat diperoleh dari penelitian ini adalah memperoleh data kesetimbangan cair-cair sistem ternar DMC + Isobutanol + air dan DMC + Tert- butanol + air pada temperatur 303.15 K dan 315.15 K. Data kesetimbangan cair-cair yang didapatkan dari penelitian ini sangat bermanfaat dalam pengembangan bahan bakar alternatif di Indonesia.

## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1 Tinjauan Penelitian

Berikut ini adalah penelitian yang telah dilakukan dengan tema kesetimbangan cair-cair yang berkaitan dengan DMC, baik secara eksperimen maupun simulasi :

Hwang, *et al.* (2011) melakukan eksperimen untuk memprediksi data kesetimbangan cair-cair system terner dari campuran dimethyl carbonate, diphenyl carbonate, phenol dan air pada suhu 358,15 K dan tekanan atmosfer menggunakan stirrer dan thermo-regulated cells : DMC + DPC + air, DMC + phenol + air dan DPC+phenol+air. Parameter data kesetimbangan yang digunakan, dikorelasikan dengan model persamaan UNIQUAC dan NRTL. Sebagai tambahan, korelasi Bachman-Brown digunakan untuk memastikan keakuratan data eksperimen dari tiap system. Untuk menganalisa digunakan GC yang dilengkapi dengan HP-5 (30 m x 0,32 mm x 0,25  $\mu$ m) kolom kapiler dan thermal conductivity detector. Suhu detector adalah 493,15 K dan suhu oven 323,15 K selama 3 menit hingga 473,15 K. Sebagai carier gas digunakan gas helium dengan flow rate 2,0 ml.s<sup>-1</sup> dalam kolom. Estimasi fraksi mol kurang dari  $1 \times 10^{-4}$ .

Hwang, *et al.* (2008) melakukan eksperimen untuk memprediksi kesetimbangan cair-cair untuk sistem biner pada *diisopropyl ether* (DIPE) dan air antara temperatur 288,15 dan 323,15 K dan untuk sistem terner dengan C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> alkohol pada temperatur 298, 15 K. Parameter kesetimbangan yang digunakan yaitu model persamaan UNIQUAC dan NRTL.

Park, *et al.* (2012) melakukan eksperimen untuk memprediksi kesetimbangan cair-cair pada suhu 298,15 K dan tekanan atmosfer untuk sistem ternary pada DMC + C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> Alkohol + Air menggunakan stirrer dan *thermo-regulated cells* : DMC+methanol+air, DMC+etanol+air, DMC+1-propanol+air, DMC+2-propanol, DMC+1-butanol+air, DMC+2-butanol+air. Parameter yang digunakan untuk LLE data system terner adalah



model persamaan UNIQUAC (UNiversal QUAsi Chemical) dan NRTL. Sebagai tambahan, korelasi Bachman-Brown digunakan untuk memastikan keakuratan data eksperimen dari tiap system. Untuk menganalisa digunakan *Gas Chromatography* yang dilengkapi dengan HP-FFAP (polietilen glycol 25 m x 0,2 mm x 0,3  $\mu\text{m}$ ) kolom kapiler dan thermal conductivity detector. Suhu detector adalah 473,15 K dan suhu oven 343,15 K selama 7 menit. Sebagai carier gas digunakan gas helium dengan flow rate 2,0  $\text{ml.s}^{-1}$  dalam kolom. Estimasi fraksi mol adalah kurang dari  $1 \times 10^{-4}$ .

(Torre, *et al.* 2010) melakukan eskperimen untuk memprediksi data kesetimbangan cair-cair sistem terner dari dimethyl carbonate-methanol-air pada suhu yang berbeda yaitu, 283,15 sampai 333,15 K. Parameter data kesetimbangan yang digunakan, dikorelasikan dengan model persamaan UNIQUAC. Kemudian data VLE dari system DMC+air pada tekanan 101,3 kPa diprediksi menggunakan model UNIQUAC dan parameter yang diperoleh dari data LLE. Hasil yang diperoleh dianalisa menggunakan *Gas Chromatography* yang dilengkapi dengan TCD. Pemisahan 3 komponen ini menggunakan 2m x 1m/8in packed column dengan Porapack Q-S 80/100 dan akurasi fraksi molnya adalah 0,001.

Jeong, *et al.* (2014) melakukan eksperimen untuk memprediksi kesetimbangan fasa dan sifat campuran untuk pemisahan reaksi intermediet yang dihasilkan selama sintesis non-phosgen diphenylcarbonate (DPC). Intermediet didasarkan pada dimetil karbonat (DMC), fenol, metanol dan anisol, dll. Secara analitis akan ditentukan kesetimbangan cair-cair (LLE) system terner untuk campuran berikut pada tekanan atmosfer dan suhu konstan: (air + DMC + anisol) pada 313,15 K ; (air + metanol + anisol) pada 308,15 K dan (air + metanol + fenol) pada 328,15 K. Selain itu, densitas, indeks bias, volume molar berlebih ( $V^E$ ) dan penyimpangan dalam molar refractivity ( $\Delta R$ ) konstituen sistem biner pada 298,15 K ditentukan. Data LLE eksperimen berkorelasi dengan excess Gibbs free model energy: Non Random



Two-Liquid (NRTL) dan Universal QUAsiChemical (UNIQUAC). Data  $V^E$  dan  $\Delta R$  yang berkorelasi dengan Redlich-Kister polynomial.

## 2.2. Isobutanol

Dalam industri kimia, isobutanol merupakan pelarut penting dan bahan baku untuk sintesis produk-produk lainnya. Juga digunakan sebagai pelarut cat dan bahan pencampur tinta, dan baru-baru ini sebagai bahan bakar alternatif seperti gasoline.

**Tabel 2.1** Properti Isobutanol (Lewis, 1997)

|                      |                                    |
|----------------------|------------------------------------|
| <b>Berat molekul</b> | 74,112 gr/gmol                     |
| <b>Rumus molekul</b> | $C_4H_{10}O$                       |
| <b>Titik didih</b>   | 226,2 °F (107,89 °C) pada 760 mmHg |
| <b>Densitas</b>      | 0.802 g/ml pada 25 °C              |

## 2.3. Tert-butanol

Tert-butanol digunakan sebagai pelarut dalam industri dan bahan penghilang cat. Kemudian tert-butanol banyak di aplikasikan sebagai oktan booster pada gasoline yang dapat meningkatkan nilai oktan pada gasoline. Selain itu tert-butanol merupakan intermediate chemical yang digunakan untuk memproduksi MTBE.

**Tabel 2.2** Properti Tert-Butanol (Lewis, 1997)

|                      |                           |
|----------------------|---------------------------|
| <b>Berat molekul</b> | 74,112 gr/gmol            |
| <b>Rumus molekul</b> | $C_4H_{10}O$              |
| <b>Titik leleh</b>   | 26 °C                     |
| <b>Titik didih</b>   | 83 °C                     |
| <b>Densitas</b>      | 0,775 g/ml pada suhu 25°C |

#### 2.4. Dimethyl Carbonate (DMC)

DMC bisa diproduksi dengan mereaksikan carbon monoksida, methanol dan air. Karena diklasifikasikan sebagai "*green solvent*", dimetil karbonat telah berkembang dalam popularitas dan diaplikasikan sebagai pengganti toluene, xylene, ethyl acetate, butyl acetate, acetone or butanone untuk memproduksi environmental coating, perekat dan tinta percetakan. DMC juga bisa digunakan sebagai tambahan bahan bakar karena memiliki kandungan oksigen yang tinggi.

**Tabel 2.3** Properti Dimethyl Carbonate ( Lewis, 1997)

|                      |                                    |
|----------------------|------------------------------------|
| <b>Berat molekul</b> | 90,08 gr/gmol                      |
| <b>Rumus molekul</b> | $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{CO}$ |
| <b>Titik leleh</b>   | 4 °C                               |
| <b>Titik didih</b>   | 90 °C                              |
| <b>Densitas</b>      | 1,073 g/ml pada 25°C               |
| <b>Kelarutan</b>     | 139 g/L pada 25°C (dalam air)      |

#### 2.5. Kesetimbangan Cair-Cair (LLE)

Sejumlah proses pemisahan yang penting dalam industri seperti absorpsi, ekstraksi, dan distilasi merupakan proses kontak dua fase. Bila fase-fase tersebut tidak berada dalam kesetimbangan maka akan terjadi transfer massa antar fase. Laju transfer masing-masing komponen tergantung dari *driving force*, dalam hal ini adalah besarnya penyimpangan sistem dari suatu kesetimbangan. Dengan demikian penentuan laju transfer massa memerlukan data kesetimbangan dari sistem tersebut. Kesetimbangan merupakan kondisi statis di mana secara makroskopis tidak ada perubahan *property* sistem terhadap waktu.

Kesetimbangan termodinamika merupakan terdistribusinya komponen dalam semua fase pada harga potensial kimia ( $\mu$ ) tertentu sehingga terjadi kesamaan potensial kimia masing-masing komponen dalam semua fase yang berada dalam kesetimbangan. Untuk sistem yang membentuk dua fase,

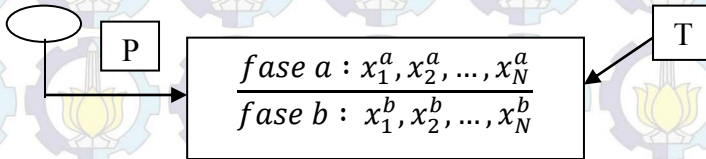
misalkan fase a dan fase b, maka harus memenuhi 3 kriteria kesetimbangan termodinamika, yaitu:

1. Kriteria I :  $T^a = T^b$  (2.1)

2. Kriteria II :  $P^a = P^b$  (2.2)

3. Kriteria III :  $\mu^a = \mu^b, i = 1, 2, 3, \dots$  (2.3)

Berikut ini ditinjau sistem tertutup yang terdiri dari dua fase dalam kesetimbangan. Di dalam sistem tertutup ini, tiap fase merupakan sistem terbuka satu sama lain yang bebas untuk memindahkan massa antar fase.



**Gambar 2.1.** Kesetimbangan Fase

Akan tetapi tidak semua sistem memiliki kesamaan potensial kimia pada temperatur dan tekanan tertentu pada kondisi kesetimbangan yang sebenarnya. Kriteria III atau yang disebut juga kriteria isoaktivasi, hanya merupakan syarat perlu (*necessary condition*) dan bukan syarat cukup (*sufficient condition*) bagi kesetimbangan mengingat bahwa kesamaan potensial tidak selalu terjadi pada kondisi kesetimbangan. Kondisi kesetimbangan yang sebenarnya terjadi jika dan hanya jika energi Gibbs pencampuran (*Gibbs energy of mixing*),  $\Delta_m G$  atau  $\Delta G$  memiliki nilai minimum.

Kriteria potensial kimia dapat dituliskan dalam bentuk fugasitas maupun aktivitas, dimana aktivitas fase cair di fase a (disebut fase ekstrak) sama dengan aktivitas fase cair di fase b (disebut fase rafinat).

$$\hat{f}_i^a = \hat{f}_i^b \quad (2.4)$$

$$(\gamma_i x_i)^a = (\gamma_i x_i)^b \quad (2.5)$$

Perhitungan kesetimbangan fase pada dasarnya bertujuan untuk menentukan komposisi setiap komponen dalam fase-fase kesetimbangan. Seperti yang telah dinyatakan di atas, pada



kondisi kesetimbangan harga  $\Delta G$  sistem mencapai minimum. Dalam perhitungan, kondisi  $\Delta G$  lebih mudah dinyatakan dalam bentuk tak berdimensi,  $(\Delta G/RT)$  karena bisa dihubungkan langsung dengan besaran tak berdimensi energi gibbs eks,  $(G^E/RT)$  menurut hubungan:

$$\left(\frac{\Delta G}{RT}\right) = \left(\frac{G^E}{RT}\right) + \sum x_i \ln x_i \quad (2.6)$$

Suku  $(\Delta G/RT)$  memiliki hubungan secara langsung dengan temperatur, komposisi, dan koefisien aktivitas. Ekspresi yang menghubungkan  $(\Delta G/RT)$  dengan komposisi kesetimbangan khususnya LLE dapat dirumuskan dalam berbagai model persamaan antara lain NRTL dan UNIQUAC, yang masing-masing mempunyai parameter sendiri. Kedua model persamaan tersebut dapat diaplikasikan untuk sistem biner, terner, atau yang lebih tinggi.

$$\begin{aligned} (\gamma_1 x_1)^a &= (\gamma_1 x_1)^b (\gamma_2 x_2)^a \\ &= (\gamma_2 x_2)^b (\gamma_3 x_3)^a = (\gamma_3 x_3)^b \end{aligned} \quad (2.7)$$

Kesetimbangan cair-cair (LLE) jauh lebih peka terhadap perubahan kecil koefisien aktivitas daripada kesetimbangan uap-cair (VLE) karena pada kesetimbangan cair-cair, koefisien aktivitas dominan. Ketidaktekelitian kecil pada koefisien aktivitas akan menimbulkan kesalahan besar. Pengaruh perubahan temperatur dalam rentang kecil pada LLE dapat diabaikan. Sedangkan pada VLE, pengaruh temperatur sangat besar. Faktor tekanan memiliki pengaruh yang sangat kecil pada LLE dalam kondisi moderat.

## 2.6. Korelasi Koefisien Aktifitas Fase Cair

### 2.6.1. Persamaan NRTL (Non Random Two Liquid)

Persamaan NRTL dikemukakan oleh Renon dan Prauznitz (1968). Persamaan ini diturunkan berdasarkan konsep *local composition* yang dipelopori oleh Wilson. Persamaan NRTL ini dapat digunakan untuk sistem yang larut sebagian maupun untuk sistem yang larut sempurna. Persamaan ini dapat dipakai secara luas dalam VLE, LLE, dan VLLE untuk berbagai jenis zat, misalnya campuran hidrokarbon jenuh dan spesies polar,

campuran senyawa non-polar, campuran spesies non-polar dan polar, campuran air dan spesies polar, dan campuran alkohol dengan campuran spesies non-polar. Untuk sistem non-ideal yang moderat (penyimpangannya sedang), persamaan ini tidak lebih baik dari persamaan Van Laar dan persamaan Margules. Tetapi untuk campuran non-ideal atau untuk larutan yang larut sebagian, persamaan ini dapat diwakili dengan data eksperimen secara cukup baik. Persamaan tersebut dinyatakan untuk sistem multikomponen sebagai berikut :

$$\left(\frac{G^E}{RT}\right) = \sum_i x_i \frac{\sum_j \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_k G_{ki} x_k} \quad i, j, k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.8)$$

$$\tau_{ji} = \frac{g_{ji} - g_{ii}}{RT} \quad (2.9)$$

$$G_{ji} = \exp(-\alpha_{ji} \tau_{ji}) \quad (2.10)$$

$$\alpha_{ji} = \alpha_{ij} \quad (2.11)$$

$$g_{ji} = g_{ij} \quad (2.12)$$

Koefisien aktifitas untuk sembarang komponen  $i$  dinyatakan sebagai berikut:

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^n \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{k=1}^n G_{ki} x_k} + \sum_{j=1}^n \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{k=1}^n G_{kj} x_k} \left( \tau_{ij} - \sum_{k=1}^n \frac{x_k \tau_{kj} G_{kj}}{\sum_{k=1}^n G_{kj} x_k} \right) \quad (2.13)$$

Keuntungan menggunakan Persamaan NRTL :

Pengalaman menunjukan bahwa Persamaan model NRTL ini memiliki keandalan yang konsisten dibanding Van Laar dan Margules dalam arti persamaan ini biasanya dapat menangani keadaan-keadaan yang sangat tidak ideal, hanya dengan dua atau tiga parameter yang dapat disesuaikan. Dan Persamaan NRTL sesuai untuk sistem multikomponen.

### 2.6.2 Model Persamaan UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical)

Persamaan UNIQUAC dikemukakan oleh Abrams dan Prausnitz (1975). Persamaan UNIQUAC dapat diaplikasikan untuk campuran liquid non-elektrolit yang mengandung fluida polar atau non-polar seperti hidrokarbon, alkohol, nitril, keton, aldehid, asam organik dan air termasuk campuran larut sebagian. Persamaan tersebut dipisahkan menjadi dua bagian yaitu bagian kombinatorial yang terdiri dari parameter komponen murni saja untuk menghitung perbedaan bentuk dan ukuran molekul, serta bagian residual yang menggabungkan dua parameter biner tiap pasang molekul untuk menghitung interaksi molekul.

$$g = g^c + g^R \quad (2.14)$$

Untuk sistem multikomponen :

$$g^c = \sum_i x_i \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} \sum_i q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} \quad (2.15)$$

$$g^R = - \sum_i q_i x_i \ln \left( \sum_j \theta_j \tau_{ji} \right) \quad i, j, k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.16)$$

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad \Phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (2.17) \quad (2.18)$$

$$\tau_{ji} = \exp \left( - \frac{(u_{ji} - u_{ii})}{RT} \right) \quad \text{dimana} \quad u_{ii} = u_{jj} = u_{kk} = 0 \quad (2.19)$$

$$u_{ji} = u_{ij} \quad (2.20)$$

Koefisien aktivitas untuk sembarang komponen i dinyatakan sebagai berikut:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^R \quad (2.21)$$

$$\ln \gamma_i^c = \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (2.22)$$



$$\ln \gamma_i^R = q_i \left( 1 - \ln s_i - \sum_j \theta_j \frac{\tau_{ij}}{s_j} \right) \quad (2.23)$$

$$J_i = \frac{r_i}{\sum_j r_j x_j} \quad (2.24)$$

$$L_i = \frac{q_i}{\sum_j q_j x_j} \quad (2.25)$$

$$s_i = \sum_l \theta_l \tau_{li} \quad (2.26)$$

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (2.27)$$

Model UNIQUAC dapat diterapkan untuk memprediksi kesetimbangan uap-cair sistem multi komponen dengan parameter energi interaksi sistem biner. Keuntungan menggunakan persamaan UNIQUAC adalah :

- Hanya mempunyai dua parameter yang dapat disesuaikan.
- Mempunyai ketergantungan yang lebih kecil terhadap suhu.
- Dapat diterapkan pada larutan dengan molekul-molekul yang besar atau kecil sebab variabel konsentrasi primer merupakan fraksi permukaan dan bukan fraksi mol.

## 2.7 Perhitungan Deviasi Hasil Eksperimen dan Prediksi

Untuk mengetahui deviasi antara hasil eksperimen dengan hasil prediksi digunakan metode *Root Mean Square Deviation* (RMSD). Perhitungan %RMSD menggunakan persamaan berikut:

$$\%RMSD = 100\% x \sqrt{\frac{\sum_k \sum_j \sum_i (x_{ijk}^{eksperimen} - x_{ijk}^{prediksi})^2}{6n}} \quad (2.28)$$

Dimana:

k = tie line = 1, 2, 3, ... ,n

i = komponen

j = fase (ekstrak atau rafinat)

OF = *objective function*

Berdasarkan persamaan di atas maka akan didapatkan %RMSD berdasarkan model paramater NRTL dan UNIQUAC.

## 2.8 Korelasi Bachman-Brown

Korelasi Bachman-Brown digunakan untuk memastikan reliabilitas dari data eksperimen. Korelasi ini menghasilkan regresi R-Squared (RSQ) yang memberikan gambaran dari data eksperimen dengan plot data  $x_1^I/x_3^{II}$  vs  $x_1^I$ ,

$$\frac{x_1^I}{x_3^{II}} = AX_1^I + B$$

Dimana A dan B adalah Bachman-Brown sedangkan parameter  $x_1^I$  adalah fraksi mol dari DMC di fase organik dan  $x_3^{II}$  adalah mol fraksi air di fase aqueous.

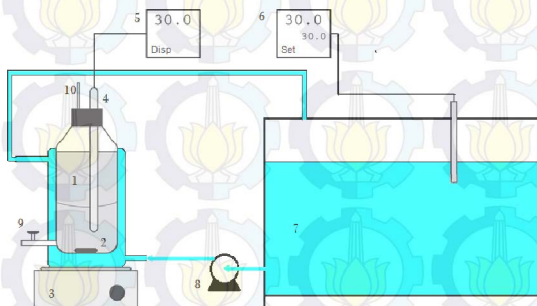
### BAB III

## METODOLOGI PENELITIAN

Penelitian ini dilakukan dengan eksperimen untuk mendapatkan data kesetimbangan cair-cair dalam fase organik dan fase *aqueous*. Selanjutnya fase organik dan fase *aqueous* hasil eksperimen tersebut dianalisa dengan menggunakan *Gas Chromatography* (GC) untuk mengetahui komposisi kesetimbangan fase. Langkah selanjutnya adalah memprediksi kesetimbangan berdasarkan korelasi model persamaan NRTL dan UNIQUAC.

#### 3.1. Peralatan Eksperimen

Percobaan ini menggunakan *equilibrium cell* yang dilengkapi dengan jaket pemanas untuk menjaga suhu agar tetap konstan serta magnetik stirer untuk membuat larutan teraduk sempurna. Pada Gambar 3.1 menunjukkan bahwa *equilibrium cell* yang terangkai yang dilengkapi dengan *PID controller* dan *RTD Pt100* untuk mengatur suhu air sirkulasi.



**Gambar 3.1** Peralatan Eksperimen



Keterangan Gambar :

- |                               |                               |
|-------------------------------|-------------------------------|
| 1. <i>Equilibrium cell</i>    | 6. <i>Temperature setting</i> |
| 2. <i>Stirrer</i>             | 7. <i>Waterbath</i>           |
| 3. <i>Magnetic stirrer</i>    | 8. Pompa                      |
| 4. <i>RTD Pt100</i>           | 9. <i>Sampling port</i>       |
| 5. <i>Temperature display</i> | 10. Pipa kapiler              |

Sedangkan untuk analisa digunakan peralatan neraca analitik OHAUS tipe AP210, microliter syringe Shimadzu, dan Shimadzu GC 2010 Plus dengan TCD Detector.

Rincian mengenai peralatan eksperimen adalah sebagai berikut:

1. Equilibrium cell dengan volume maksimal 50 mL.
2. Ketidakpastian dan akurasi pengukuran dari alat *Autonics RTD Pt100* dan *PID Controller ANLY AT-502* adalah  $0.05\text{ }^{\circ}\text{C}$  dan  $\pm 1.4\text{ }^{\circ}\text{C}$ .
3. Ketidakpastian dan akurasi pengukuran dari neraca analitik OHAUS tipe AP210 adalah  $\pm 0.1\text{ mg}$ .
4. Kapasitas maksimum dan ketidakpastian pengukuran dari microliter syringe Shimadzu adalah  $10\text{ }\mu\text{L}$  dan  $\pm 0.1\text{ }\mu\text{L}$ .
5. Standar deviasi Shimadzu GC 2010 Plus adalah  $0.9\text{ }\%$  area.

### 3.2. Bahan Yang Digunakan

Bahan-bahan yang digunakan pada percobaan ini adalah *Dimethyl Carbonate* yang diperoleh dari Wuhan Fortuna Chemical Co., LTD, China, dengan kemurnian 99%, Isobutanol p.a (MERCK) dengan kemurnian 99.9%, *Tert Butanol* p.a (MERCK) dengan kemurnian 99%, dan Aquabidesilata.

### 3.3. Scope Penelitian

Pada penelitian ini dilakukan pengukuran kesetimbangan cair-cair untuk sistem DMC – Isobutanol - Air dan DMC – *Tert-butanol* - Air pada suhu 303,15 dan 313,15 K pada tekanan atmosfer.

### 3.4. Prosedur Eksperimen

#### 3.4.1. Eksperimen

Tahap percobaan dilakukan untuk memperoleh data kesetimbangan fase. Percobaan dilakukan dengan cara mencampurkan bahan yang telah diketahui komposisinya ke dalam *equilibrium cell*. Peralatan ini dilengkapi dengan *magnetic stirrer* dan jaket untuk sirkulasi air sebagai pemanas sesuai suhu yang dikehendaki. Campuran kemudian diaduk pada suhu 303.15 dan 313.15 K pada tekanan atmosferik selama 4 jam. Setelah 4 jam pengadukan dihentikan, kemudian campuran dibiarkan sampai mencapai kesetimbangan selama 20 jam. Setelah kesetimbangan tercapai pada masing-masing fase diambil sampel untuk dianalisa komposisinya memakai *Gas Chromatography* (GC) Shimadzu 2010 Plus menggunakan kolom Stabilwax untuk analisa sistem DMC – Isobutanol – Air dan kolom Rtx-5 untuk analisa sistem DMC – Tert-butanol – Air.

#### 3.4.2. Analisa

Analisa komposisi sistem terner DMC – Isobutanol – Air dan DMC – Tertbutanol – Air dianalisa menggunakan *Gas Chromatography*. Metode yang pertama untuk sistem terner DMC – Isobutanol – Air menggunakan *carrier gas* helium dengan laju alir gas 2 mL/menit, *purge flow* 3 mL/menit, *column flow* 0.4 mL/menit dan split ratio 60:1. Selain itu, suhu injector dan suhu detector yang digunakan adalah 190 °C, kemudian suhu kolom dijaga pada suhu 70 °C dengan waktu analisa tiap sampel adalah 5 menit. Metode yang kedua untuk sistem DMC – Tertbutanol – Air menggunakan *carrier gas* helium dengan laju alir gas 2 mL/menit, *purge flow* 3 mL/menit, *column flow* 0.4 mL/menit dan split ratio 60:1. Selain itu, suhu injector dan suhu detector yang digunakan adalah 250 °C, kemudian suhu kolom dijaga pada suhu 70 °C dengan waktu analisa tiap sampel adalah 7.5 menit. Setelah kondisi analisa GC tersebut tercapai, sampel

sebesar 1 microliter diinjeksikan ke dalam kolom. Hasil kuantitatif sampel dideteksi menggunakan detector jenis TCD (*Thermal conductivity Detector*). *Detector* jenis TCD ini untuk mendeteksi senyawa-senyawa berdasarkan perbedaan penghantar panas. Hasil yang didapatkan berupa grafik yang dapat diketahui retention time dan fraksi area masing-masing zat.

### **3.5. Diagram Alir Metodologi Penelitian**

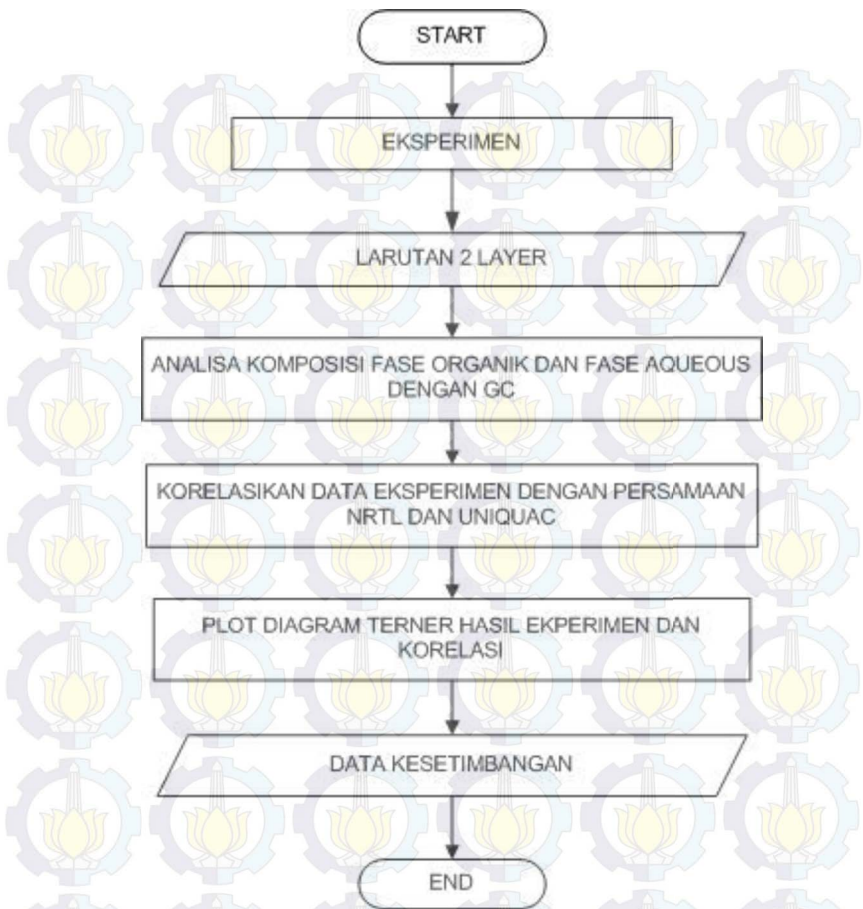
#### **3.5.1 Diagram Alir Metode Penelitian**

Diagram Alir penelitian disajikan pada Gambar 3.2.

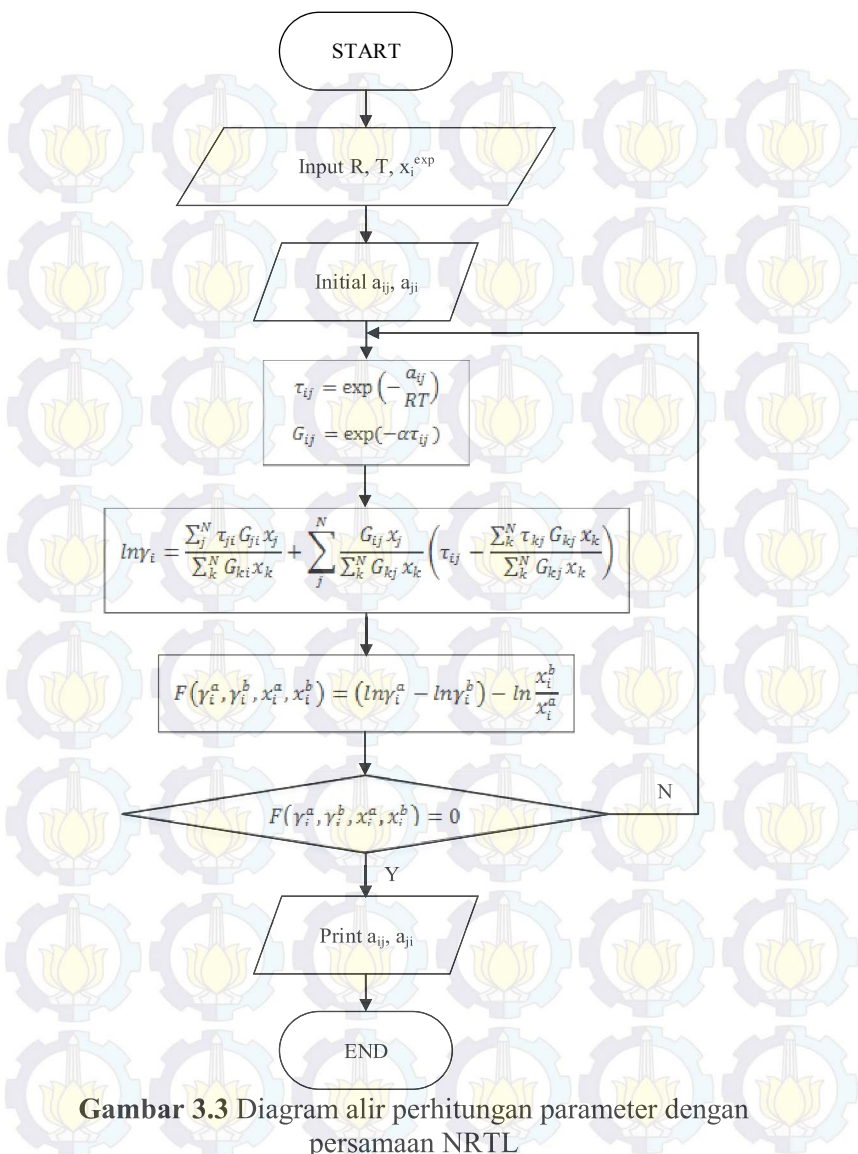
#### **3.5.2 Diagram Blok Perhitungan Koefisien Aktifitas dan fitting parameter**

Untuk menghitung koefisien aktifitas kesetimbangan cair-cair sistem ternar DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert butanol + Air ini digunakan persamaan UNIQUAC dan NRTL. Berikut ini adalah langkah-langkah untuk menghitung koefisien aktifitas dengan menggunakan persamaan NRTL.

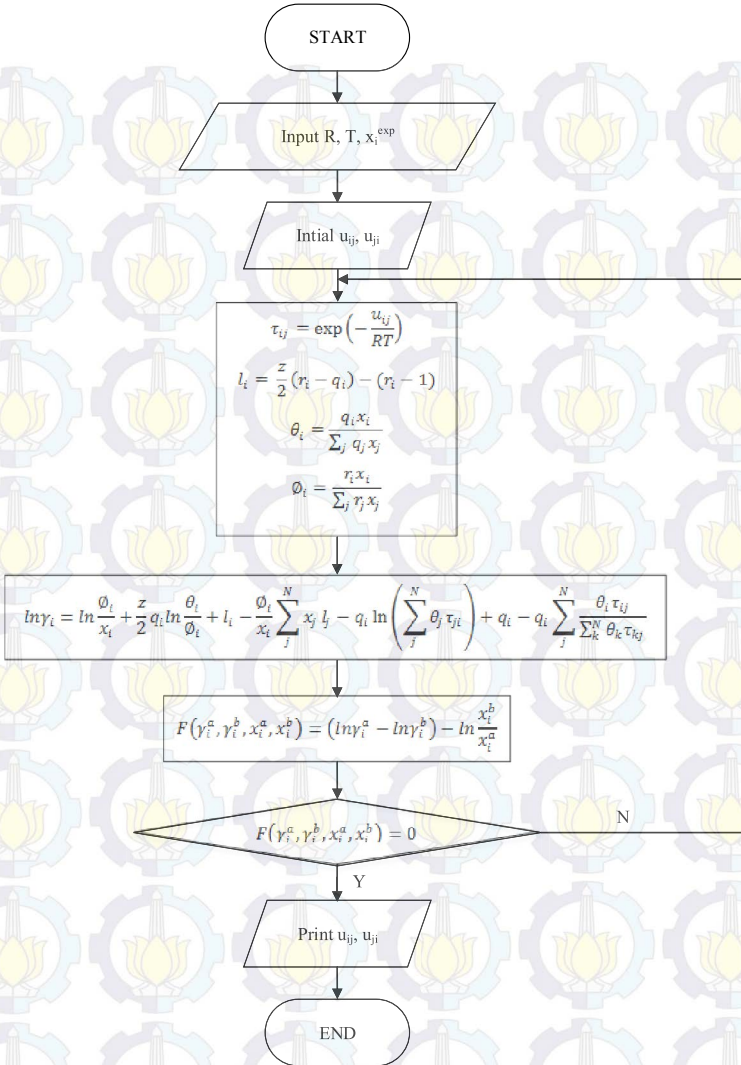




**Gambar 3.2** Diagram Alir Penelitian



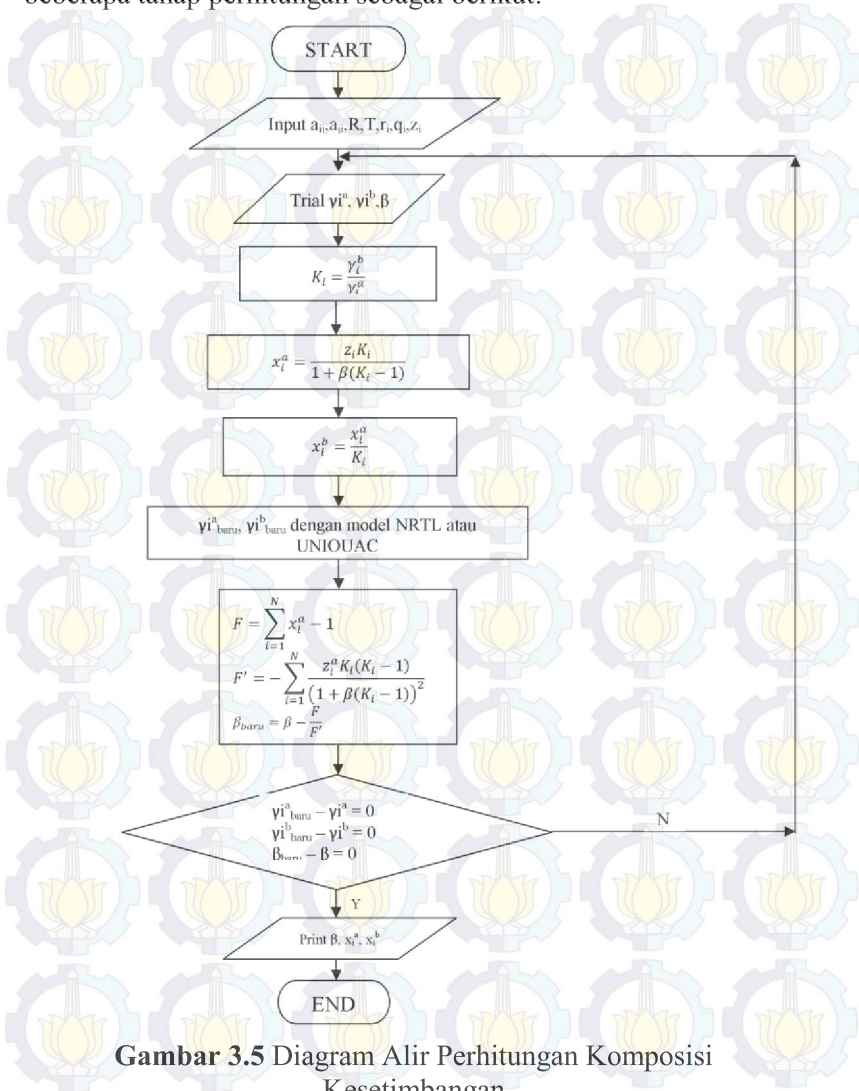
**Gambar 3.3** Diagram alir perhitungan parameter dengan persamaan NRTL



**Gambar 3.4** Diagram alir perhitungan parameter dengan persamaan UNIQUAC



Dalam penentuan komposisi komponen, dilakukan beberapa tahap perhitungan sebagai berikut.



**Gambar 3.5** Diagram Alir Perhitungan Komposisi Keseimbangan

## BAB IV HASIL & PEMBAHASAN

### 4.1 Hasil dan Pembahasan Eksperimen

Pada penelitian ini dilakukan pengukuran kesetimbangan fase cair-cair sistem Dimethyl Carbonate + Isobutanol + Air dan sistem Dimethyl Carbonate + Tert-Butanol + Air pada suhu 303,15 dan 313,15 K dengan tekanan atmosferik. Data penelitian ini kemudian dikorelasikan menggunakan persamaan UNIQUAC dan NRTL. Kedua persamaan ini dipilih karena dapat diterapkan pada kesetimbangan cair-cair (LLE) sistem biner maupun multikomponen pada berbagai jenis campuran. Hasil persamaan korelasi kedua model diatas diharapkan dapat digunakan untuk interpolasi dan ekstrapolasi kesetimbangan fase sistem tersebut.

Dalam penelitian ini, dilakukan validasi alat dalam percobaan dengan membandingkan hasil eksperimen penelitian sebelumnya yang telah dilakukan oleh Zeng *et al*, (2013) dimana diagram terner validasi ini dapat dilihat melalui Gambar 4.1. Berdasarkan hasil validasi dapat dilihat bahwa data eksperimen telah sesuai dengan data eksperimen Zeng *et al*, (2013). Selain itu untuk mengetahui realibilitas data maka data eksperimen ini dan data eksperimen Zeng *et al*, (2013) dikorelasikan dengan Korelasi Bachman-Brown. Korelasi ini didasarkan pada konsistensi persebaran data baik di fase organic maupun di fase aqueous di setiap titik sesuai dengan persamaan :

$$\frac{X_1^I}{X_3^{II}} = AX_1^I + B$$

Dimana,

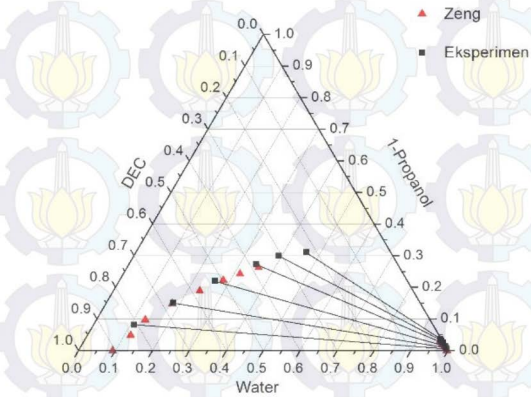
$X_1^I$  = Fraksi DEC di fase organic

$X_3^{II}$  = Fraksi DEC di fase aqueous

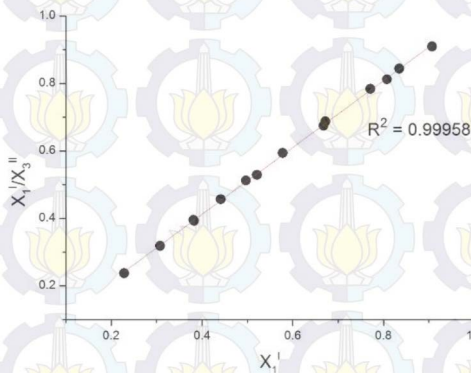
A = Gradient

B = Intersept

Dari Gambar 4.2 dapat disimpulkan bahwa data eksperimen sudah *reliable*. Ini dapat disimpulkan dari nilai regresi yang mendekati angka 1 (0,9995). Sehingga alat yang digunakan dalam penelitian ini telah tervalidasi dan siap untuk digunakan.



Gambar 4.1



Gambar 4.2 Korelasi Bachman-Brown Sistem DEC + 1-Propanol + Water pada 303.15 K



Pada eksperimen kesetimbangan cair-cair sistem Dimethyl Carbonate (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3) pada suhu 303,15 dan 313,15 K terdistribusi menjadi dua fase (fase atas dan bawah). Komposisi data kesetimbangan sistem ini diperoleh dari hasil analisa dengan menggunakan *Gas Chromatography* (GC). Adapun data kesetimbangan cair-cair hasil eksperimen yang diperoleh untuk sistem Dimethyl Carbonate (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3) untuk suhu 303,15 dan 313,15 K ditunjukkan oleh Tabel 4.1. Sedangkan untuk sistem Dimethyl Carbonate (1) + Tert-Butanol (2) + Air (3) pada suhu 303,15 dan 313,15 K dapat dilihat pada tabel 4.2.

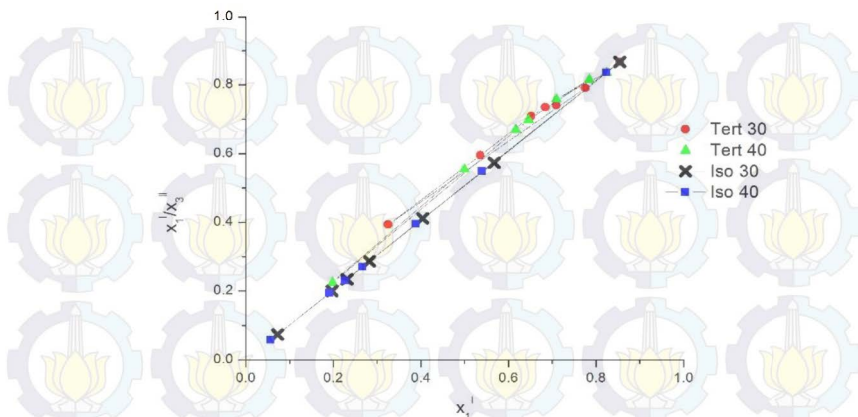
**Tabel 4.1** Data eksperimen kesetimbangan cair-cair sistem Dimethyl Carbonate (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3)

| T(K)   | Fase Organik   |                |                | Fase Aqueous   |                |                |
|--------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
|        | X <sub>1</sub> | X <sub>2</sub> | X <sub>3</sub> | X <sub>1</sub> | X <sub>2</sub> | X <sub>3</sub> |
| 303.15 | 0,0000         | 0,5428         | 0,4573         | 0,0000         | 0,0126         | 0,9874         |
|        | 0,1969         | 0,3039         | 0,4993         | 0,0093         | 0,0081         | 0,9826         |
|        | 0,2311         | 0,2832         | 0,4857         | 0,0082         | 0,0071         | 0,9848         |
|        | 0,2827         | 0,2433         | 0,4740         | 0,0078         | 0,0061         | 0,9861         |
|        | 0,4041         | 0,1871         | 0,4089         | 0,0120         | 0,0057         | 0,9823         |
|        | 0,5673         | 0,1389         | 0,2938         | 0,0067         | 0,0038         | 0,9894         |
|        | 0,8541         | 0,0000         | 0,1459         | 0,0141         | 0,0000         | 0,9859         |
|        | 0,0727         | 0,4369         | 0,4904         | 0,0039         | 0,0116         | 0,9845         |
|        | 0,8242         | 0,0000         | 0,1758         | 0,0136         | 0,0000         | 0,9864         |
| 313.15 | 0,5392         | 0,1022         | 0,3586         | 0,0144         | 0,0037         | 0,9819         |
|        | 0,3890         | 0,1564         | 0,4546         | 0,0077         | 0,0058         | 0,9865         |
|        | 0,2662         | 0,2215         | 0,5123         | 0,0085         | 0,0069         | 0,9846         |
|        | 0,2270         | 0,2467         | 0,5264         | 0,0081         | 0,0079         | 0,9840         |
|        | 0,1914         | 0,2681         | 0,5405         | 0,0065         | 0,0081         | 0,9854         |
|        | 0,0000         | 0,5255         | 0,4745         | 0,0000         | 0,0153         | 0,9847         |
|        | 0,0571         | 0,4456         | 0,4974         | 0,0044         | 0,0132         | 0,9823         |
|        | 0,0571         | 0,4456         | 0,4974         | 0,0044         | 0,0132         | 0,9823         |

**Tabel 4.2** Data eksperimen kesetimbangan cair-cair system  
Dimethyl Carbonate (1) + Tert-Butanol (2) + Air (3)

| T(K)   | Fase Organik   |                |                | Fase Aqueous   |                |                |
|--------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
|        | X <sub>1</sub> | X <sub>2</sub> | X <sub>3</sub> | X <sub>1</sub> | X <sub>2</sub> | X <sub>3</sub> |
| 303.15 | 0,7093         | 0,0701         | 0,2205         | 0,0293         | 0,0138         | 0,9569         |
|        | 0,6842         | 0,0794         | 0,2364         | 0,0443         | 0,0245         | 0,9312         |
|        | 0,6516         | 0,0946         | 0,2538         | 0,0504         | 0,0309         | 0,9187         |
|        | 0,5355         | 0,1121         | 0,3524         | 0,0538         | 0,0461         | 0,9001         |
|        | 0,3251         | 0,1360         | 0,5389         | 0,0986         | 0,0750         | 0,8264         |
|        | 0,7756         | 0,0517         | 0,1726         | 0,0141         | 0,0050         | 0,9809         |
|        | 0,8548         | 0,0000         | 0,1452         | 0,0141         | 0,0000         | 0,9859         |
| 313.15 | 0,4995         | 0,1202         | 0,3803         | 0,0481         | 0,0510         | 0,9009         |
|        | 0,1979         | 0,1068         | 0,6953         | 0,0607         | 0,0584         | 0,8809         |
|        | 0,6168         | 0,0955         | 0,2877         | 0,0353         | 0,0422         | 0,9225         |
|        | 0,6461         | 0,0846         | 0,2693         | 0,0376         | 0,0371         | 0,9253         |
|        | 0,7843         | 0,0407         | 0,1750         | 0,0290         | 0,0090         | 0,9619         |
|        | 0,7094         | 0,0648         | 0,2259         | 0,0410         | 0,0229         | 0,9361         |
|        | 0,8242         | 0,0000         | 0,1758         | 0,0136         | 0,0000         | 0,9864         |

Selanjutnya data eksperimen dikorelasikan dengan persamaan Bachman-Brown yang digunakan untuk memastikan *reliability* dari data eksperimen. Korelasi ini memberikan gambaran dari data eksperimen untuk kedua sistem (DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert-butanol + Air). Korelasi Bachman-Brown untuk kedua sistem pada suhu 303,15 K dan 313,15 K ditampilkan pada **Gambar 4.3**.



**Gambar 4.3** Korelasi Bachman-Brown ternery system DMC + Isobutanol + Air dan DMC + Tert-butanol + Air pada 303,15 K dan 313,15 K

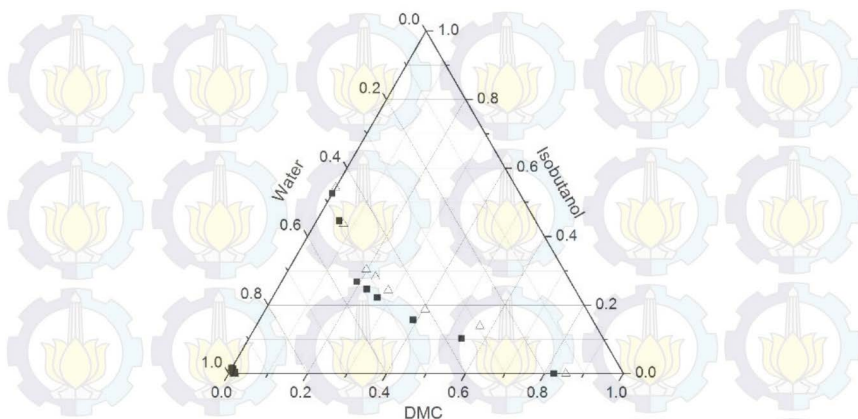
**Tabel 4.3** Bachman-Brown parameter

| Suhu     | Parameter | Iso-Butanol | Tert-Butanol |
|----------|-----------|-------------|--------------|
| 303.15 K | A         | 1.013       | 0.887        |
|          | B         | 0.0005      | 0.114        |
|          | R         | 1           | 0.994        |
| 313.15 K | A         | 1.014       | 0.99         |
|          | B         | 0.0004      | 0.045        |
|          | R         | 1           | 0.993        |

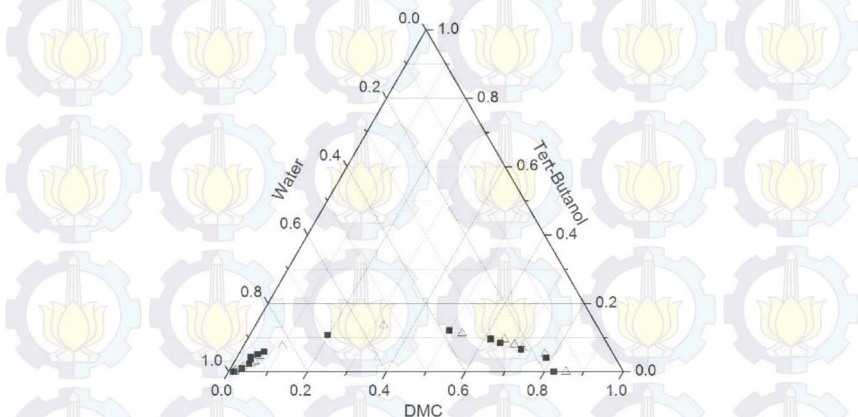
Berdasarkan Gambar 4.3 dan Tabel 4.3 terlihat bahwa hasil korelasi menunjukkan regresi untuk kedua sistem mendekati 1. Hal ini menunjukkan bahwa data eksperimen sudah valid dan *reliable*.

Kemudian data komposisi hasil eksperimen pada masing-masing suhu operasi digambarkan dalam diagram LLE system terner yang dapat dilihat pada Gambar 4.4 dan Gambar 4.5.





**Gambar 4.4** Hasil Eksperimen Kesenimbangan Cair-Cair Sistem DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu ( $\Delta$ ) 303.15 K ; ( $\blacksquare$ ) 313.15 K



**Gambar 4.5** Hasil Eksperimen Kesenimbangan Cair-Cair Sistem DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada ( $\Delta$ ) 303.15 K ; ( $\blacksquare$ ) 313.15 K

Berdasarkan Gambar 4.4 dan Gambar 4.5 terlihat komposisi kesetimbangan untuk kedua sistem pada suhu 303.15 K dan 313.15 K baik di fase organik maupun di fase aqueous. Untuk sistem DMC (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3) merupakan sistem dengan Treyball tipe II karena sistem tersebut memiliki 2 komponen senyawa yang sebagian tidak larut yaitu antara DMC (1) + Air (3) dan Iso-Butanol (2) + Air (3) sedangkan untuk sistem DMC (1) + Tert-Butanol (2) + Air (3) merupakan sistem dengan Treyball tipe I karena sistem tersebut memiliki 1 komponen senyawa yang sebagian tidak larut yaitu DMC (1) + Air (3).

Dari diagram LLE tersebut juga dapat disimpulkan bahwa untuk sistem DMC (1) + Iso-Butanol (2) + Air (3) suhu berpengaruh secara signifikan terhadap data kesetimbangan. Ini dapat diketahui dari area dua fasa data eksperimen pada suhu 303,15 K yang lebih besar dibandingkan dengan area dua fasa pada suhu 313,15 K. Sedangkan untuk sistem DMC (1) + Tert-Butanol (2) + Air (3) dapat diketahui bahwa suhu tidak berpengaruh secara signifikan terhadap grafik LLE. Hal ini dapat dilihat dari area dua fasa yang hampir sama untuk suhu operasi 303,15 K dan 313,15 K.

Kecenderungan gugus polar  $-OH$  di dalam alkohol mempengaruhi besar nya kelarutan Alkohol dengan Air dimana semakin panjang rantai karbon pada alkohol akan mengurangi kelarutannya di dalam air. Dimana rantai karbon merupakan senyawa bersifat hidropobik sedangkan pada gugus  $OH$  bersifat hidrofilik sehingga semakin luas nya luas bagian hidropobik mengakibatkan berkurang nya kelarutan terhadap air. Tert-Butanol merupakan senyawa yang larut sempurna pada air, dimana ini terjadi karena senyawa hidrofilik lebih kuat terhadap gugus alkilnya sedangkan pada Iso-Butanol terjadi *gap* kelarutan terhadap Air dan ini terjadi karena luas area gugus alkil yang cukup besar.

## 4.2. Hasil Prediksi Kesetimbangan

### 4.2.1 Penentuan Parameter

Data hasil eksperimen yang diperoleh dikorelasikan dengan menggunakan persamaan NRTL dan UNIQUAC yang digunakan untuk sistem multikomponen. Penentuan parameter (*fitting*) dengan model NRTL, ditetapkan harga ( $\alpha = 0.2$ ) dimana harga tersebut berdasarkan eksperimen yang telah dilakukan oleh Hwang *et al.*, (2012). Sedangkan penentuan parameter (*fitting*) dengan persamaan UNIQUAC ditentukan terlebih dahulu harga luas permukaan molekular (q) dan volume molekular (r) untuk tiap-tiap komponen. Pengujian validitas dilakukan berdasarkan acuan harga *root square mean deviation* (RMSD) yaitu penyimpangan absolute rata-rata komposisi antara data eksperimen dan hasil perhitungan menggunakan persamaan model. Pengujian dilakukan dengan cara membandingkan hasil perhitungan harga RMSD persamaan UNIQUAC dan NRTL pada masing-masing temperature. Adapun hasil parameter yang diperoleh dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC ditunjukkan pada tabel 4.4 – 4.5. Sedangkan parameter UNIQUAC yang digunakan dalam melakukan perhitungan persamaan UNIQUAC disajikan dalam tabel 4.4.

**Tabel 4.4** UNIQUAC Parameter Luas dan Volume molekul (Praunzitz, 2004)

| Chemicals    | UNIQUAC |       |
|--------------|---------|-------|
|              | r       | Q     |
| DMC          | 3,0613  | 2,816 |
| Iso-Butanol  | 3,4686  | 3,124 |
| Tert-Butanol | 3,9228  | 3,744 |
| Air          | 0,92    | 1,4   |



**Tabel 4.5** Hasil Parameter persamaan NRTL

| Sistem                       | NRTL parameter (K) |              |          | $\alpha$ | % RMSD |
|------------------------------|--------------------|--------------|----------|----------|--------|
|                              | i-j                | $a_{ij}$     | $a_{ji}$ |          |        |
| DMC + Isobutanol<br>+ Air    | 1-2                | -<br>1842,26 | 198,31   | 0,2      | 0,7    |
|                              | 2-3                | 2248,23      | 819,97   |          |        |
|                              | 1-3                | 3015,94      | 253,64   |          |        |
| DMC + Tert-<br>Butanol + Air | 1-2                | -<br>1242,07 | 2856,75  | 0,2      | 0,7    |
|                              | 2-3                | -<br>1544,77 | 2261,93  |          |        |
|                              | 1-3                | 2778,45      | -323,41  |          |        |

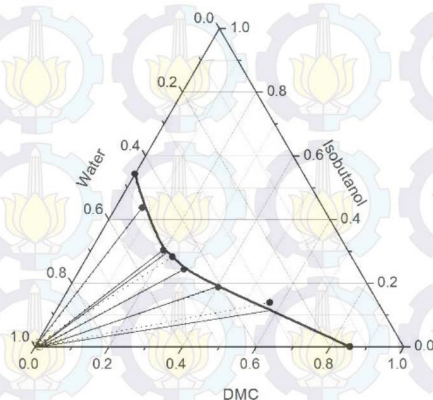
**Tabel 4.6** Hasil Parameter persamaan UNIQUAC

| Sistem                          | UNIQUAC parameter (K) |          |          | % RMSD |
|---------------------------------|-----------------------|----------|----------|--------|
|                                 | i-j                   | $a_{ij}$ | $a_{ji}$ |        |
| DMC + Isoutanol<br>+ Air        | 1-2                   | 57,56    | 80,26    | 0,6    |
|                                 | 2-3                   | 130,41   | 176,51   |        |
|                                 | 1-3                   | 246,43   | 229,99   |        |
| DMC + Tert-<br>Butanol<br>+ Air | 1-2                   | -4,08    | -137,82  | 0,6    |
|                                 | 2-3                   | 30,02    | 50,56    |        |
|                                 | 1-3                   | 238,58   | 197,04   |        |

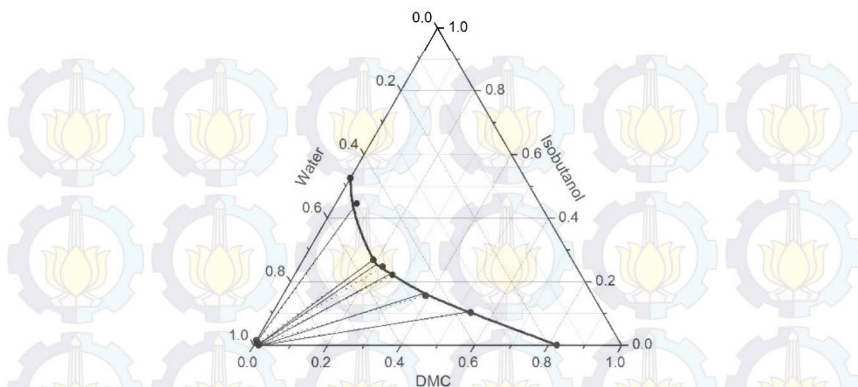
*Fitting* parameter dilakukan dengan menggunakan satu data parameter untuk suhu 303,15 K dan suhu 313,15 K pada masing-masing sistem. Hasil yang didapatkan sangat baik sehingga parameter tunggal ini juga bisa digunakan untuk merepresentasikan data-data kesetimbangan untuk suhu 303,15 K – 313,15 K. Berdasarkan hasil korelasi pada Tabel 4.5 – 4.6 persamaan UNIQUAC dan NRTL menunjukkan hasil yang baik. Hal ini dapat dilihat melalui nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*) pada kedua persamaan (UNIQUAC dan NRTL) yang menunjukkan nilai RMSD kurang dari 1 %.

#### 4.2.2. Korelasi Data Kesetimbangan

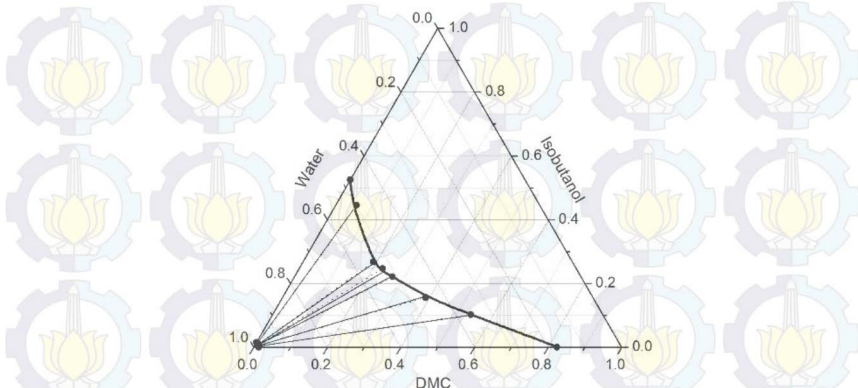
Korelasi data kesetimbangan sistem terner Dimethyl Carbonate + Isobutanol + Air dan sistem Dimethyl Carbonate + Tert-butanol + Air dengan menggunakan persamaan NRTL dan UNIQUAC ditunjukkan pada Gambar 4.6 sampai Gambar 4.13.



**Gambar 4.6** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Terner DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 303,15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan NRTL

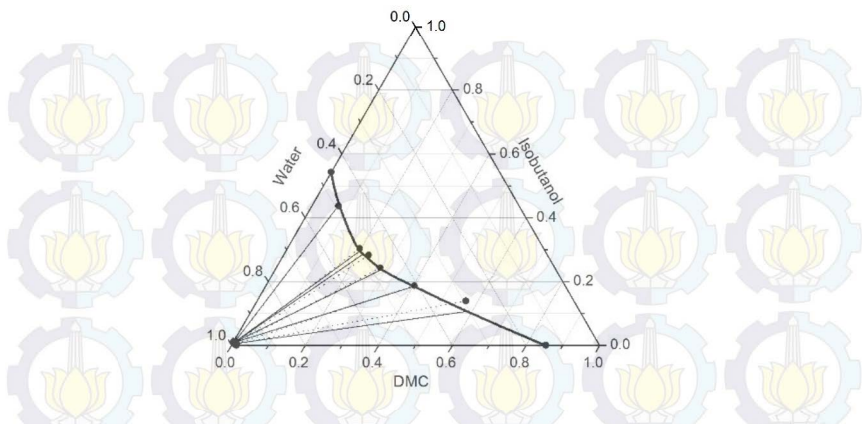


**Gambar 4.7** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan *Tie Line* dengan Persamaan NRTL

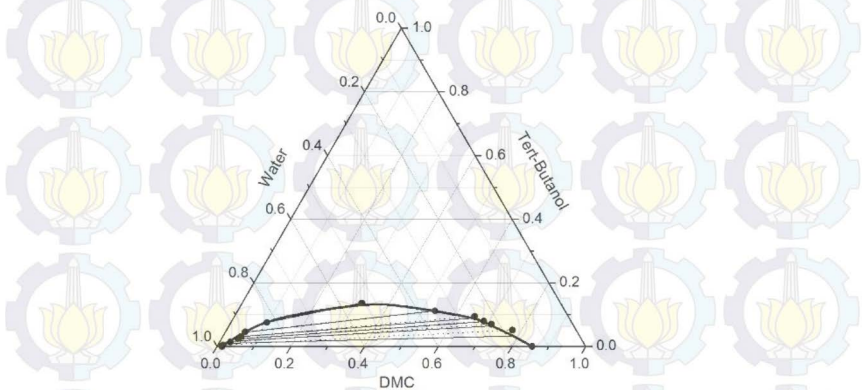


**Gambar 4.8** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 303.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan *Tie Line* dengan Persamaan UNIQUAC

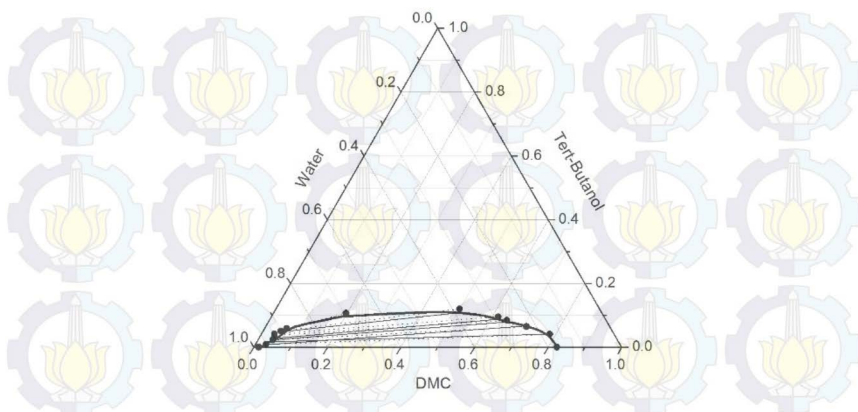




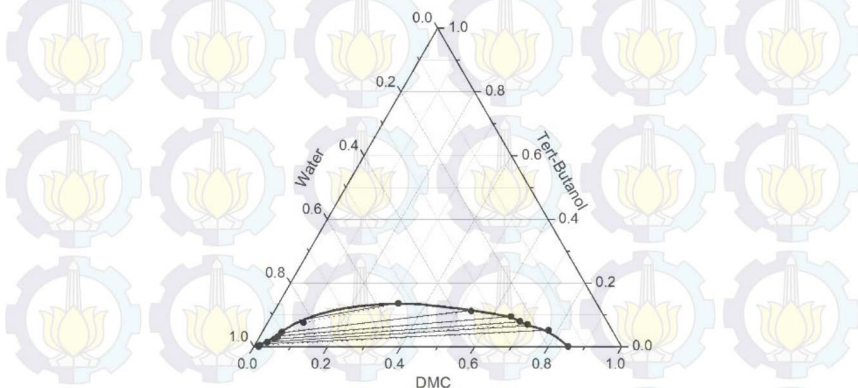
**Gambar 4.9** Diagram Kestimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Isobutanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC



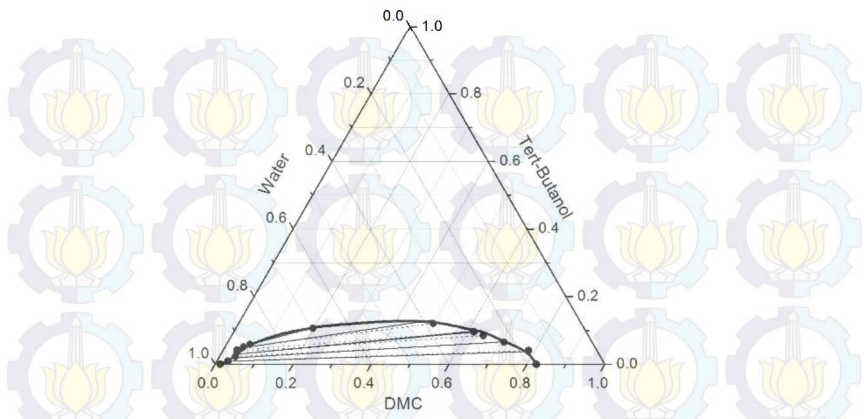
**Gambar 4.10** Diagram Kestimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 303.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan NRTL



**Gambar 4.11** Diagram Kesenimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan NRTL



**Gambar 4.12** Diagram Kesenimbangan Cair-Cair Sistem Ternar DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 303.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC



**Gambar 4.13** Diagram Kesetimbangan Cair-Cair Sistem Terner DMC (1) + Tert-butanol (2) + Air (3) pada Suhu 313.15 K ;  
 (●) Data Eksperimen ; (---) Tie Line Eksperimen ;  
 (—) Binodal dan Tie Line dengan Persamaan UNIQUAC

Berdasarkan Gambar diatas dapat dilihat bahwa persamaan NRTL dan UNIQUAC dapat merepresentasikan data kesetimbangan LLE dengan sangat baik. Hal ini dapat juga dilihat dari nilai RMSD pada masing-masing persamaan yang sangat kecil (kurang dari 1 %).



## DAFTAR PUSTAKA

Adia, Tinjauan Pustaka Zat Aditif Bahan Bakar, Universitas Pendidikan Indonesia, Bandung 2008.

Advance Motor Fuels, 2011. Fuel Butanol Properties. Tersedia di [http://www.iea-amf.org/content/fuel\\_information/butanol/properties](http://www.iea-amf.org/content/fuel_information/butanol/properties).

Choi, C.H.; Reitz, R.Y. An Experimental Study on The Effects of Oxygenated Fuel Blends and Multiple Injection Strategies on Diesel Engine Emission, *Journal of Fuel*, **1999**, 78, 1303-1217.

Hwang, I.C.; Park, S.J.; and Han, J.K. Liquid-Liquid Equilibria for The Ternary System of Dimethyl Carbonate, Diphenyl Carbonate, Phenol and Water in 358,15 K and Atmospheric Pressure, *Fluid Phase Equilibria*, **2011**, 301, 18-21.

Hwang, I.C.; Park, S.J.; and J.S Choi. Liquid-Liquid Equilibria for the Binary System of di-isopropyl Ether (DIPE) + Water in between 288,15 and 323,15 K and the Ternary systems of DIPE + Water + C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> Alcohols at 298,15 K, *Fluid Phase Equilibria*, **2008**, 269, 1-5.

Jeong, I.Y.; You, S.H.; Park, S.J., Ternary liquid-liquid equilibria and binary excess and deviation properties at constant temperature for mixture of dimethyl carbonate, anisole, methanol, phenol and water, *Fluid Phase Equilibria*, **2014**, 378, 93-101.

Kadarohman A. Eksplorasi Minyak Atsiri sebagai Bioaditif Bahan Bakar, Program Study Kimia FMIPA, UPI Bandung, 2003.

Lewis, SR.; R.J. Condensed Chemical Dictionary 3<sup>rd</sup> ed. John Wiley & Sons, Inc. New York, USA, 1997.

Park, S.J.; Hwang, I.C.; Han, K.J. Liquid-liquid Equilibria for Ternary Systems of Dimethyl Carbonate + C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> Alcohols + Water at 298,15 K and Atmosphere Pressure, Journal of Industrial and Engineering Chemistry 18, **2012**, 499-503.

Pereiro A.B.; Canosa J.; Rodriguez A. Liquid-Liquid Equilibria of 1,3 dimethylimidazolium Methyl Sulfate with Ketones, Dialkyl Carbonates and Acetates, Fluid Phase Equilibria, **2007**, 254, 150-157.

Polling, B.E.; Prausnitz, J.M.; and O'Connell, J.P. The Properties Of Gases and Liquids, 5<sup>th</sup> edition, Singapore: Mc Graw-Hill International Edition, 2004.

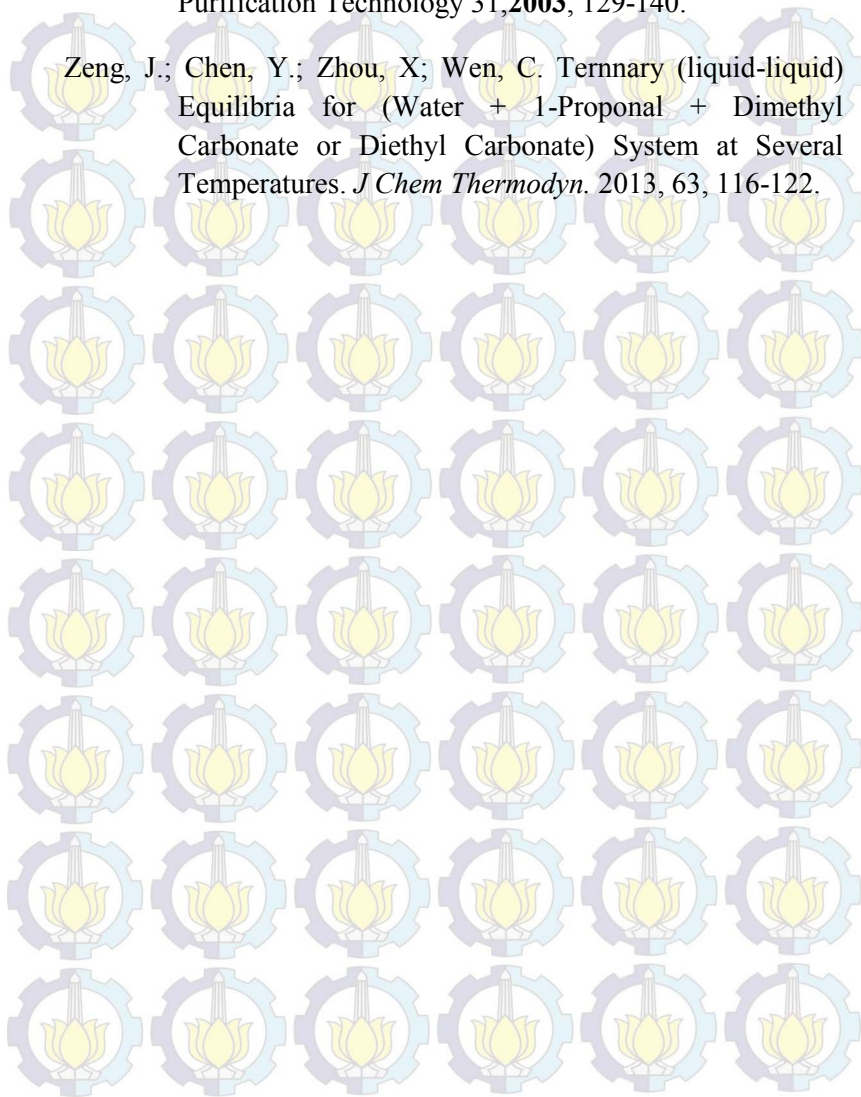
Song, J. Effect of Oxygenated Fuel on Combustion and Emissions in a Light-Duty Turbo Diesel Engine, The Pennsylvania State University, Pennsylvania : University Park, 2001.

Torre J.; Chafer A.; Berna A.; Munoz R. Liquid-Liquid Equilibria of the System Dimethyl Carbonate + Methanol + Water at Different Temperatures, Fluid Phase Equilibria, **2006**, 247, 40-46.

Won, W.; Feng, X.; Lawless, D. Separation of Dimethyl Carbonate/Methanol/ Water Mixtures by Pervaporation

Using Crosslinked Chitosan Membranes, Separation and Purification Technology 31, **2003**, 129-140.

Zeng, J.; Chen, Y.; Zhou, X; Wen, C. Ternary (liquid-liquid) Equilibria for (Water + 1-Propanal + Dimethyl Carbonate or Diethyl Carbonate) System at Several Temperatures. *J Chem Thermodyn.* 2013, 63, 116-122.







## **BAB V**

### **KESIMPULAN**

Dari hasil penelitian dan perhitungan yang telah dilakukan dapat ditarik kesimpulan sebagai berikut :

1. Didapatkan data kesetimbangan cair-cair sistem DMC + Isobutanol + Air dan sistem DMC + Tert-butanol + Air pada temperatur 303.15 K dan 313.15 K
2. Pada sistem DMC + Isobutanol + Air suhu berpengaruh secara signifikan pada data Kesetimbangan (LLE). Sedangkan pada sistem DMC + Tert-butanol + Air suhu tidak berpengaruh secara signifikan.
3. Untuk sistem ternary DMC+ Isobutanol + Air pada suhu 303,15 K dan 313,15 K dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC didapatkan RMSD masing-masing 0,7 % dan 0,6 %. Untuk sistem ternary DMC+ Tert-butanol + Air pada suhu 303,15 K dan 313,15 K dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC didapatkan RMSD masing-masing 0,7 % dan 0,6%.



## APPENDIKS

1. Perhitungan Mol Masing-Masing Komponen Dalam Sampel  
Diambil contoh perhitungan sampel sistem terner Dimethyl Carbonate+ Isobutanol + water pada suhu 30°C.

Diketahui.

Densitas Dimethyl Carbonate : 1,073g/ml

Densitas Tert-butanol : 0,775 g/ml

Densitas air : 1 g/ml

BM Dimethyl Carbonate : 90,08g/mol

BM Tert-butanol : 74,12 g/mol

BM air : 18 g/mol

Volume Dimethyl Carbonate : 12 mL

Volume Tert-butanol : 15 mL

Volume air : 3 mL

Perhitungan massa:

$$\begin{aligned}\text{Massa Dimethyl Carbonate} &= \rho \text{ Dimethyl Carbonate} \times \text{volume Dimethyl Carbonate} \\ &= 1,073 \text{ gram/ml} \times 12 \text{ ml} \\ &= 12,876 \text{ gram}\end{aligned}$$

Dengan cara yang sama didapatkan massa Tert-butanol dan massa air yaitu:

$$\text{Massa Isobutanol} = 11,625 \text{ gram}$$

$$\text{Massa air} = 3 \text{ gram}$$

Perhitungan mol komponen:

$$\begin{aligned}\text{Mol Dimethyl Carbonate}(n_1) &= \frac{\text{massa Dimethyl Carbonate}}{\text{BM Dimethyl Carbonate}} \\ &= \frac{12,876}{90,08} \\ &= 0,143 \text{ mol}\end{aligned}$$

Dengan cara yang sama didapatkan mol Tert-butanol( $n_2$ ) dan mol air ( $n_3$ ), yaitu:

$$n_2 = 0,1568 \text{ mol}$$

$$n_3 = 0,1667 \text{ mol}$$

Menghitung fraksi mol overall ( $z_i$ ) untuk masing-masing komponen dalam sampel:



$$\begin{aligned}\text{Mol total (n}_{\text{total}}) &= n_1 + n_2 + n_3 \\ &= 0,143\text{mol} + 0,1568\text{mol} + 0,1667\text{mol} \\ &= 0,4665\text{mol}\end{aligned}$$

$$\text{ZDimethyl Carbonate(z}_1) = \frac{n_1}{n_{\text{total}}} = \frac{0,143 \text{ mol}}{0,4665 \text{ mol}} = 0,3065$$

Dengan cara yang sama diperoleh z untuk masing-masing komponen dalam setiap sampel yang kemudian akan digunakan untuk menghitung kesetimbangan dengan model NRTL dan UNIQUAC.

## 2. Hasil analisa eksperimen dengan menggunakan *Gas Chromatography* (GC)

Sampel-sampel dari percobaan yang telah dilakukan selanjutnya dianalisa dengan menggunakan *Gas Chromatography* (GC) agar komposisi tiap-tiap komponen dapat diketahui. Berikut ini merupakan prosedur yang digunakan untuk memperoleh komposisi tiap sampel menggunakan *Gas Chromatography* (GC) :

### a. Perhitungan Kurva Kalibrasi

Kurva Kalibrasi menggunakan metode kalibrasi biner fraksi mol sebagai contoh digunakan perhitungan kalibrasi biner Dimethyl Carbonatedan Tert-butanolsebagai berikut:

➤ Menimbang berat masing-masing komponen murni (Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol) sehingga didapatkanperbandingan fraksi mol sebagai berikut:

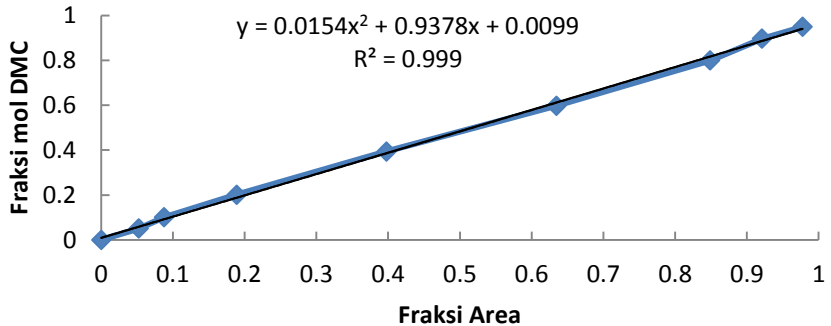
| Fraksi Mol | Massa Dimethyl Carbonate(gram) | Massa Tert-butanol (gram) |
|------------|--------------------------------|---------------------------|
| 1 : 0      | 9,008                          | 0                         |
| 0,8 : 0,2  | 7,2064                         | 1,4824                    |
| 0,6 : 0,4  | 5,4048                         | 2,9648                    |
| 0,4 : 0,6  | 3,6032                         | 4,4472                    |
| 0,2 : 0,8  | 1,8016                         | 5,9296                    |
| 0 : 1      | 0                              | 7,412                     |



- Menginjeksikan campuran Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol dengan perbandingan fraksi mol 1:0 ke dalam Gas Chromatography sebanyak 1  $\mu$ L
- Dari hasil analisa Gas Chromatography didapatkan area dan retention time
- Selanjutnya dengan prosedur yang sama menginjeksikan campuran Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol untuk perbandingan fraksi mol yang lain
- Membuat kurva kalibrasi untuk mendapatkan persamaan regresi untuk kalibrasi biner Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol dengan memplot fraksi area terhadap fraksi mol

| Fraksi Mol | Fraksi Area        |              |
|------------|--------------------|--------------|
|            | Dimethyl Carbonate | Tert-butanol |
| 1 : 0      | 1                  | 0            |
| 0,8 : 0,2  | 0,848694           | 0,151306     |
| 0,6 : 0,4  | 0,634593           | 0,365407     |
| 0,4 : 0,6  | 0,397471           | 0,602529     |
| 0,2 : 0,8  | 0,188731           | 0,811269     |
| 0 : 1      | 0                  | 1            |

## DMC



**Gambar 1** Kurva Kalibrasi Biner Dimethyl Carbonatedan Tert-butanol

b. Perhitungan Komposisi Eksperimen

- Menginjeksikan sampel fase organik ke dalam Gas Chromatography sebanyak 1  $\mu\text{L}$
- Dari hasil analisa Gas Chromatography didapatkan area masing-masing komponen
- Mensubstitusi fraksi area masing-masing komponen ke persamaan regresi hasil dari kalibrasi untuk mendapatkan fraksi mol masing-masing komponen

Hasil Perhitungan Komposisi Sampel 1 Fase Organik Dimethyl Carbonate+ Tert-butanol + Air pada Temperatur 303.15 K

| Komponen           | Fraksi Area | Fraksi Mol |
|--------------------|-------------|------------|
| Dimethyl Carbonate | 0,21127     | 0,17294    |
| Tert-butanol       | 0,62485     | 0,52801    |
| Air                | 0,16388     | 0,29905    |
| <b>Total</b>       | <b>1</b>    | <b>1</b>   |

### 3. Menghitung Parameter NRTL

Untuk mencari parameter NRTL kita tentukan terlebih dahulu nilai  $\alpha = 0.2 - 0.47$ . Setelah itu diambil nilai awal harga parameter yang akan ditrial, antara lain  $a_{ij}$  dan  $a_{ji}$  yang akan digunakan menghitung  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$  dengan persamaan sebagai berikut:

$$\tau_{ij} = \frac{a_{ij}}{RT} \quad (1)$$

$$\tau_{ji} = \frac{a_{ji}}{RT} \quad (2)$$

Setelah didapatkan  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$ , maka langkah selanjutnya adalah menghitung  $G_{ij}$  dan  $G_{ji}$ :

$$G_{ij} = \exp(-\alpha\tau_{ij}) \quad (3)$$

$$G_{ji} = \exp(-\alpha\tau_{ji}) \quad (4)$$

Dimana:

$$\tau_{ii} = 0$$

$$G_{ii} = 1$$

Kemudian parameter-parameter tersebut digunakan untuk menghitung  $\gamma_i$ :

$$\ln\gamma_i = \frac{\sum_j^N \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_k^N G_{ki} x_k} + \sum_j^N \frac{G_{ij} x_j}{\sum_k^N G_{kj} x_k} \left( \tau_{ij} - \frac{\sum_k^N x_k \tau_{kj} G_{kj}}{\sum_k^N G_{kj} x_k} \right) \quad (5)$$

Kemudian menghitung nilai F :

$$F(\gamma_i^a, \gamma_i^b, X_i^a, X_i^b) = (\ln\gamma_i^a - \ln\gamma_i^b) - \ln \frac{X_i^b}{X_i^a} \quad (6)$$

Selanjutnya adalah meminimalkan nilai F untuk mendapatkan parameter yang sesuai. Kemudian menghitung nilai  $K_i$ :

$$\text{Neraca Massa Total} : F_i = L^a + L^b$$

$$\text{Neraca Massa Komponen} : F_i Z_i = L^a X_i^a + L^b X_i^b$$

$$L^b = F_i - L^a$$

$$F_i Z_i = L^a X_i^a + (F_i - L^a) X_i^b$$

Dibagi dengan  $F_i$  akan menghasilkan persamaan :

$$Z_i = \frac{L^a}{F_i} X_i^a + \left(1 - \frac{L^a}{F_i}\right) X_i^b$$

$$\text{Dimana } \beta = \frac{L^a}{F_i} \text{ dan } K_i = \frac{X_i^a}{X_i^b} = \frac{\gamma_i^b}{\gamma_i^a}$$

Sehingga :

$$Z_i = \beta X_i^a + (1-\beta)X_i^b$$

$$Z_i = \beta X_i^a + (1-\beta)X_i^a/K_i$$

Dikali dengan  $K_i$  :

$$Z_i K_i = \beta X_i^a K_i + (1-\beta)X_i^a$$

$$Z_i K_i = X_i^a (\beta K_i + (1-\beta))$$

Maka diperoleh perhitungan flash calculation :

$$X_i^a = \frac{Z_i K_i}{\beta K_i + (1-\beta)} = \frac{Z_i K_i}{1 + \beta(K_i - 1)} \quad (7)$$

$$X_i^b = \frac{Z_i}{1 + \beta(K_i - 1)} \quad (8)$$

Nilai  $\beta$  pada persamaan di atas ditrial sehingga untuk mendapat nilai  $\beta$  yang sesuai dilakukan solver dengan meminimalkan nilai objective function.

#### 4. Menghitung Parameter UNIQUAC

Untuk menghitung parameter UNIQUAC, yang akan dicari adalah  $u_{ij}$  dan  $u_{ji}$  dimana data ini kemudian digunakan untuk menghitung  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$  dengan persamaan sebagai berikut:

$$\tau_{ij} = \exp\left(-\frac{u_{ij}}{RT}\right) \quad (9)$$

$$\tau_{ji} = \exp\left(-\frac{u_{ji}}{RT}\right) \quad (10)$$

Kemudian dihitung nilai  $l_i$ ,  $r_i$ , dan  $q_i$  dimana  $r_i$  adalah parameter volume komponen  $i$  dan  $q_i$  adalah parameter luasan komponen  $i$ .

$$l_i = \frac{z}{2}(r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (11)$$

$$\varphi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (12)$$

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad (13)$$

Setelah didapatkan harga-harga parameter diatas, langkah selanjutnya adalah menghitung nilai  $\gamma_i$  dengan persamaan:

$$\ln \gamma_i = \ln \frac{\varphi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\varphi_i} + l_i - \frac{\varphi_i}{x_i} \sum_j^N x_j l_j - q_i \ln \left( \sum_j^N \theta_j \tau_{ji} \right) + q_i - q_i \sum_j^N \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_k^N \theta_k \tau_{kj}} \quad (14)$$

Dimana nilai  $z=10$

Kemudian menghitung nilai  $F$  :



$$F(\gamma_i^a, \gamma_i^b, X_i^a, X_i^b) = (\ln \gamma_i^a - \ln \gamma_i^b) - \ln \frac{X_i^b}{X_i^a} \quad (15)$$

Selanjutnya adalah meminimalkan nilai F untuk mendapatkan parameter yang sesuai. Kemudian menghitung nilai  $K_i$  :

$$\text{Neraca Massa Total} : F_i = L^a + L^b$$

$$\text{Neraca Massa Komponen} : F_i Z_i = L^a X_i^a + L^b X_i^b$$

$$L^b = F_i - L^a$$

$$F_i Z_i = L^a X_i^a + (F_i - L^a) X_i^b$$

Dibagi dengan  $F_i$  akan menghasilkan persamaan :

$$Z_i = \frac{L^a}{F_i} X_i^a + (1 - \frac{L^a}{F_i}) X_i^b$$

$$\text{Dimana } \beta = \frac{L^a}{F_i} \text{ dan } K_i = \frac{X_i^a}{X_i^b} = \frac{\gamma_i^b}{\gamma_i^a}$$

Sehingga :

$$Z_i = \beta X_i^a + (1 - \beta) X_i^b$$

$$Z_i = \beta X_i^a + (1 - \beta) X_i^a / K_i$$

Dikali dengan  $K_i$  :

$$Z_i K_i = \beta X_i^a K_i + (1 - \beta) X_i^a$$

$$Z_i K_i = X_i^a (\beta K_i + (1 - \beta))$$

Maka diperoleh perhitungan flash calculation :

$$X_i^a = \frac{Z_i K_i}{\beta K_i + (1 - \beta)} = \frac{Z_i K_i}{1 + \beta(K_i - 1)} \quad (16)$$

$$X_i^b = \frac{Z_i}{1 + \beta(K_i - 1)} \quad (17)$$

Nilai  $\beta$  pada persamaan di atas dittrial sehingga untuk mendapat nilai  $\beta$  yang sesuai dilakukan solver dengan meminimalkan nilai objective function.

5. Perhitungan Deviasi Hasil Percobaan dengan Hasil Perhitungan  
Setelah mendapatkan komposisi kesetimbangan masing-masing komponen, langkah selanjutnya yaitu mengevaluasi hasil fitting parameter dengan menggunakan perhitungan deviasi, dalam hal ini adalah root mean square deviations (RMSD). Persamaannya sebagai berikut:

$$OF = \sum_{n=1}^N \sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2$$

Dimana n adalah jumlah tie line; i, j, dan k adalah komponen, fase, dan tie line. Setelah itu menghitung nilai RMSD dengan persamaan,

$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2}{6n}}$$

## 6. Contoh Perhitungan

### 6.1 Perhitungan Menggunakan Persamaan NRTL

Berikut adalah contoh perhitungan prediksi kesetimbangan dengan model NRTL untuk sampel Dimethyl Carbonate+ Tert-butanol +air pada suhu 303,15 K. Diketahui dari data eksperimen:

$$\begin{aligned} x_1^a &= 0,70933 \\ x_2^a &= 0,07013 \\ x_3^a &= 0,22053 \\ x_1^b &= 0,0293 \\ x_2^b &= 0,01378 \\ x_3^b &= 0,95692 \end{aligned}$$

ditetapkan harga  $\alpha = 0,2$ ;  $R = 8,314 \text{ J/mol.K}$ ;  $T = 303,15 \text{ K}$ .

Langkah pertama yaitu trial harga  $a_{ij}$  dan  $a_{ji}$  sehingga didapatkan nilai  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$  dengan persamaan (1) dan (2) sehingga diperoleh :

| Komponen | $\tau_{ij}$ | $\tau_{ji}$ |
|----------|-------------|-------------|
| 1-2      | 0,03968     | 0,03968     |
| 1-3      | 0,03968     | 0,03968     |
| 2-3      | 0,03968     | 0,03968     |

Langkah selanjutnya adalah menghitung  $G_{ij}$  dan  $G_{ji}$  dengan persamaan (3) dan (4) sehingga diperoleh :

| Komponen | $G_{ij}$ | $G_{ji}$ |
|----------|----------|----------|
| 1-2      | 0,992096 | 0,992096 |

|            |          |          |
|------------|----------|----------|
| <b>1-3</b> | 0,992096 | 0,992096 |
| <b>2-3</b> | 0,992096 | 0,992096 |

Setelah didapatkan harga parameter di atas, kemudian menghitung  $\gamma_i$  dengan menggunakan persamaan (5) sehingga diperoleh :

$$\gamma_1^a = 1,05808$$

$$\gamma_2^a = 1,01749$$

$$\gamma_3^a = 1,02267$$

$$\gamma_1^b = 1,01018$$

$$\gamma_2^b = 1,03496$$

$$\gamma_3^b = 1,05104$$

Selanjutnya meminimalkan nilai F dengan persamaan (6) sehingga didapatkan parameter interaksi  $a_{ij}$  dan  $a_{ji}$  yang sesuai yaitu :

| Komponen   | $a_{ij}$ | $a_{ji}$ |
|------------|----------|----------|
| <b>1-2</b> | 563.43   | -3360,88 |
| <b>1-3</b> | 2768.51  | -366.978 |
| <b>2-3</b> | -2256.4  | 2242.86  |

Kemudian menghitung  $K_1$

$$K_1 = \frac{\gamma_i^b}{\gamma_i^a}$$

$$K_1 = 25,85531$$

Dengan cara yang sama didapatkan:

$$K_2 = 4,808032$$

$$K_3 = 0,241897$$

Dari data awal diketahui:

$$z_1 = 0,491$$

$$z_2 = 0,056$$

$$z_3 = 0,453$$

Trial nilai  $\beta$  dengan nilai 0,5

Kemudian menghitung komposisi kesetimbangan dengan perhitungan flash calculation pada persamaan (7) dan (8):

$$x_1^a = 0,78860$$

$$x_1^b = 0,04779$$



Dengan cara yang sama didapatkan

$$x_2^a = 0,06780$$

$$x_2^b = 0,02209$$

$$x_3^a = 0,14359$$

$$x_3^b = 0,93011$$

Setelah dilakukan solver untuk mendapatkan nilai  $\beta$  yang sesuai didapatkan komposisi kesetimbangan yang baru yaitu :

$$x_1^a = 0,71158$$

$$x_1^b = 0,02865$$

$$x_2^a = 0,06602$$

$$x_2^b = 0,01429$$

$$x_3^a = 0,22239$$

$$x_3^b = 0,95705$$

#### Perhitungan Deviasi Hasil Percobaan dengan Hasil Perhitungan

Untuk menghitung nilai objection function (OF) dengan memasukkan data eksperimen:

$$x_1^a = 0,70933$$

$$x_2^a = 0,07013$$

$$x_3^a = 0,22053$$

$$x_1^b = 0,0293$$

$$x_2^b = 0,01378$$

$$x_3^b = 0,95692$$

Dan data hasil perhitungan

$$x_1^a = 0,71158$$

$$x_1^b = 0,02865$$

$$x_2^a = 0,06602$$

$$x_2^b = 0,01429$$

$$x_3^a = 0,22239$$

$$x_3^b = 0,95705$$

Menggunakan persamaan



$$OF = \sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2$$

Setelah mendapatkan parameter, langkah selanjutnya yaitu menghitung RMSD dengan menggunakan persamaan:

$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2}{6n}}$$

Sehingga didapatkan harga RMSD sebesar 0,46 %.

## 6.2 Perhitungan Menggunakan Persamaan UNIQUAC

Berikut adalah contoh perhitungan prediksi kesetimbangan dengan model NRTL untuk sampel Dimethyl Carbonate + Tert-butanol +air pada suhu 303,15 K. Diketahui dari data eksperimen:

$$x_1^a = 0,70933$$

$$x_2^a = 0,07013$$

$$x_3^a = 0,22053$$

$$x_1^b = 0,0293$$

$$x_2^b = 0,01378$$

$$x_3^b = 0,95692$$

Ditetapan harga  $R=8.314 \text{ j/mol.K}$ ;  $T=303.15 \text{ K}$

Langkah pertama yaitu trial harga  $u_{ij}$  dan  $u_{ji}$  sehingga didapatkan nilai  $\tau_{ij}$  dan  $\tau_{ji}$  dengan persamaan (9) dan (10) sehingga diperoleh :

Komponen

**1-2**  $\tau_{ij}$  0,9611  $\tau_{ji}$  0, 9611

**1-3** 0, 9611 0, 9611

**2-3** 0, 9611 0, 9611

Diketahui data parameter luasan dan volume:

$$r_1 = 3,0613$$

$$r_2 = 3,9228$$

$$r_3 = 0,92$$

$$q_1 = 2,816$$

$$q_2 = 3,744$$

$$q_3 = 1.4$$

Kemudian dihitung nilai  $l_i$ ,  $\varphi_i$ , dan  $\theta_i$  menggunakan persamaan (11), (12), dan (13).

$$I_1 = -2.32$$

$$I_2 = -2,0288$$

$$I_3 = -0,8348$$

$$\varphi_1^a = 0,40715$$

$$\varphi_2^a = 0,17164$$

$$\varphi_3^a = 0,42121$$

$$\varphi_1^b = 0,00895$$

$$\varphi_2^b = 0,01796$$

$$\varphi_3^b = 0,97309$$

$$\theta_1^a = 0,52917$$

$$\theta_2^a = 0,13991$$

$$\theta_3^a = 0,33092$$

$$\theta_1^b = 0,01472$$

$$\theta_2^b = 0,01850$$

$$\theta_3^b = 0,96677$$

Langkah selanjutnya adalah menghitung  $\gamma_i$  untuk fase atas dan bawah dengan menggunakan persamaan (14) didapatkan:

$$\gamma_1^a = 1,53933$$

$$\gamma_2^a = 0,00834$$

$$\gamma_3^a = 53,98795$$

$$\gamma_1^b = 40,67201$$

$$\gamma_2^b = 0,04442$$

$$\gamma_3^b = 0,9301$$

Selanjutnya meminimalkan nilai F dengan persamaan (15) sehingga didapatkan parameter interaksi  $u_{ij}$  dan  $u_{ji}$  yang sesuai yaitu :

Komponen

$a_{ij}$

$a_{ji}$

**1-2**

-190.513

-269,162

|     |         |          |
|-----|---------|----------|
| 1-3 | 142,391 | 628,715  |
| 2-3 | 137,362 | -95,6849 |

Kemudian menghitung  $K_1$

$$K_i = \frac{\gamma_i^b}{\gamma_i^a}$$

$$K_1 = 26,4219$$

Dengan cara yang sama didapatkan:

$$K_2 = 5,32647$$

$$K_3 = 0,23323$$

Dari data awal diketahui:

$$z_1 = 0,491$$

$$z_2 = 0,056$$

$$z_3 = 0,453$$

Trial nilai  $\beta$  dengan nilai 0,5

Kemudian menghitung komposisi kesetimbangan dengan perhitungan flash calculation pada persamaan (16) dan (17):

$$x_1^a = 0,79112$$

$$x_1^b = 0,04663$$

Dengan cara yang sama didapatkan

$$x_2^a = 0,06913$$

$$x_2^b = 0,02021$$

$$x_3^a = 0,13975$$

$$x_3^b = 0,93316$$

Setelah dilakukan solver untuk mendapatkan nilai  $\beta$  yang sesuai didapatkan komposisi kesetimbangan yang baru yaitu:

$$x_1^a = 0,71173$$

$$x_1^b = 0,02723$$

$$x_2^a = 0,06672$$

$$x_2^b = 0,01266$$

$$x_3^a = 0,22155$$

$$x_3^b = 0,96011$$

|                    |                |              |                  |               |              |
|--------------------|----------------|--------------|------------------|---------------|--------------|
| <u>Perhitungan</u> | <u>Deviasi</u> | <u>Hasil</u> | <u>Percobaan</u> | <u>dengan</u> | <u>Hasil</u> |
| <u>Perhitungan</u> |                |              |                  |               |              |



Untuk menghitung nilai objection function (OF) dengan memasukkan data eksperimen:

$$x_1^a = 0,70933$$

$$x_2^a = 0,07013$$

$$x_3^a = 0,22053$$

$$x_1^b = 0,0293$$

$$x_2^b = 0,01378$$

$$x_3^b = 0,95692$$

Dan data hasil perhitungan

$$x_1^a = 0,71173$$

$$x_1^b = 0,02723$$

$$x_2^a = 0,06672$$

$$x_2^b = 0,01266$$

$$x_3^a = 0,22155$$

$$x_3^b = 0,96011$$

Menggunakan persamaan

$$OF = \sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2$$

Setelah mendapatkan parameter, langkah selanjutnya yaitu menghitung RMSD dengan menggunakan persamaan:

$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N [x_{ijk} - x_{ijk}^{cal}]^2}{6n}}$$

Sehingga didapatkan harga RMSD sebesar 0,53 %.



## LAMPIRAN

1. RMSD NRTL sistem DMC(1) + Iso-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 303.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{\text{exp}}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{\text{cal}}$ ) |        |        | $(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{cal}})^2$ |          |         |
|--------|---------|-----------------------------------|--------|--------|------------------------------------|--------|--------|---|----------|---------|
|        |         | $X_1$                             | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                              | $X_2$  | $X_3$  | DMC                                       | ISO      | AIR     |
| 1      | Organik | 0,0000                            | 0,5428 | 0,4573 | 0,0000                             | 0,5428 | 0,4572 | 0   | 3,01E-10 | 3E-10   |
|        | Aqueous | 0,0000                            | 0,0126 | 0,9874 | 0,0000                             | 0,0119 | 0,9881 | 0   | 6,11E-07 | 6,1E-07 |
| 2      | Organik | 0,1969                            | 0,3039 | 0,4993 | 0,1953                             | 0,3052 | 0,4994 | 2,4E-06                                   | 1,91E-06 | 3E-08   |
|        | Aqueous | 0,0087                            | 0,0096 | 0,9817 | 0,0104                             | 0,0041 | 0,9854 | 3E-06                                     | 2,99E-05 | 1,4E-05 |
| 3      | Organik | 0,2311                            | 0,2832 | 0,4857 | 0,2119                             | 0,2997 | 0,4884 | 0,00037                                   | 0,000273 | 6,8E-06 |
|        | Aqueous | 0,0051                            | 0,0085 | 0,9864 | 0,0113                             | 0,0030 | 0,9857 | 3,9E-05                                   | 3,03E-05 | 5,1E-07 |
| 4      | Organik | 0,2827                            | 0,2433 | 0,4740 | 0,2821                             | 0,2437 | 0,4742 | 4,3E-07                                   | 1,58E-07 | 6,8E-08 |
|        | Aqueous | 0,0091                            | 0,0002 | 0,9906 | 0,0151                             | 0,0019 | 0,9830 | 3,6E-05                                   | 2,67E-06 | 5,8E-05 |
| 5      | Organik | 0,4041                            | 0,1871 | 0,4089 | 0,4015                             | 0,1901 | 0,4085 | 6,8E-06                                   | 9E-06    | 1,5E-07 |
|        | Aqueous | 0,0122                            | 0,0005 | 0,9874 | 0,0179                             | 0,0008 | 0,9813 | 3,2E-05                                   | 1,03E-07 | 3,6E-05 |
| 6      | Organik | 0,5673                            | 0,1389 | 0,2938 | 0,5827                             | 0,1147 | 0,3025 | 0,00024                                   | 0,000584 | 7,7E-05 |
|        | Aqueous | 0,0107                            | 0,0005 | 0,9888 | 0,0144                             | 0,0002 | 0,9853 | 1,4E-05                                   | 6,61E-08 | 1,2E-05 |
| 7      | Organik | 0,8541                            | 0,0000 | 0,1459 | 0,8542                             | 0,0000 | 0,1458 | 2,6E-09                                   | 0        | 2,6E-09 |
|        | Aqueous | 0,0141                            | 0,0000 | 0,9859 | 0,0096                             | 0,0000 | 0,9904 | 2E-05                                     | 0        | 2E-05   |
| 8      | Organik | 0,0727                            | 0,4369 | 0,4904 | 0,0728                             | 0,4452 | 0,4982 | 3,2E-08                                   | 6,76E-05 | 6E-05   |
|        | Aqueous | 0,0049                            | 0,0133 | 0,9819 | 0,0020                             | 0,0097 | 0,9849 | 8,2E-06                                   | 1,24E-05 | 9,5E-06 |
| OF     |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,0019154                                 |          |         |

2. RMSD NRTL sistem DMC(1) + Iso-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 313.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{exp}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{cal}$ ) |        |        | $(X_i^{exp}-X_i^{cal})^2$ |          |         |
|--------|---------|----------------------------|--------|--------|-----------------------------|--------|--------|---------------------------|----------|---------|
|        |         | $X_1$                      | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                       | $X_2$  | $X_3$  | DMC                       | ISO      | AIR     |
| 1      | Organik | 0,8242                     | 0,0000 | 0,1758 | 0,8241                      | 0,0000 | 0,1759 | 7,4E-10                   | 0        | 7,4E-10 |
|        | Aqueous | 0,0136                     | 0,0000 | 0,9864 | 0,0151                      | 0,0000 | 0,9849 | 2,2E-06                   | 0        | 2,2E-06 |
| 2      | Organik | 0,5392                     | 0,1022 | 0,3586 | 0,5399                      | 0,1011 | 0,3590 | 5,1E-07                   | 1,13E-06 | 1,2E-07 |
|        | Aqueous | 0,0144                     | 0,0037 | 0,9819 | 0,0119                      | 0,0041 | 0,9840 | 6,1E-06                   | 1,91E-07 | 4,1E-06 |
| 3      | Organik | 0,3890                     | 0,1564 | 0,4546 | 0,3865                      | 0,1597 | 0,4538 | 6,2E-06                   | 1,08E-05 | 6,3E-07 |
|        | Aqueous | 0,0077                     | 0,0058 | 0,9865 | 0,0089                      | 0,0051 | 0,9860 | 1,5E-06                   | 5,13E-07 | 2,8E-07 |
| 4      | Organik | 0,2662                     | 0,2215 | 0,5123 | 0,2649                      | 0,2229 | 0,5122 | 1,7E-06                   | 1,81E-06 | 2,6E-09 |
|        | Aqueous | 0,0082                     | 0,0059 | 0,9859 | 0,0085                      | 0,0065 | 0,9850 | 9,7E-08                   | 3,28E-07 | 7,8E-07 |
| 5      | Organik | 0,2270                     | 0,2467 | 0,5264 | 0,2334                      | 0,2404 | 0,5263 | 4,1E-05                   | 3,97E-05 | 8,7E-09 |
|        | Aqueous | 0,0077                     | 0,0055 | 0,9869 | 0,0085                      | 0,0066 | 0,9849 | 6,5E-07                   | 1,3E-06  | 3,8E-06 |
| 6      | Organik | 0,1914                     | 0,2681 | 0,5405 | 0,1939                      | 0,2658 | 0,5403 | 6,4E-06                   | 5,18E-06 | 6E-08   |
|        | Aqueous | 0,0065                     | 0,0081 | 0,9854 | 0,0081                      | 0,0072 | 0,9848 | 2,5E-06                   | 8,54E-07 | 4,5E-07 |
| 7      | Organik | 0,0000                     | 0,5255 | 0,4745 | 0,0000                      | 0,5310 | 0,4846 | 0                         | 3,02E-05 | 0,0001  |
|        | Aqueous | 0,0000                     | 0,0153 | 0,9847 | 0,0000                      | 0,0068 | 0,9932 | 0                         | 7,26E-05 | 7,3E-05 |
| 8      | Organik | 0,0571                     | 0,4456 | 0,4974 | 0,0534                      | 0,4226 | 0,5261 | 1,3E-05                   | 0,000528 | 0,00083 |
|        | Aqueous | 0,0050                     | 0,0087 | 0,9863 | 0,0037                      | 0,0071 | 0,9565 | 1,6E-06                   | 2,76E-06 | 0,00088 |

**OF**  
**% RMSD**

0,003236  
0,732

3. RMSD NRTL sistem DMC(1) + Tert-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 303.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{exp}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{cal}$ ) |        |        | $(X_i^{exp} - X_i^{cal})^2$ |          |         |
|--------|---------|----------------------------|--------|--------|-----------------------------|--------|--------|-----------------------------|----------|---------|
|        |         | $X_1$                      | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                       | $X_2$  | $X_3$  | DMC                         | TERT     | AIR     |
| 1      | Organik | 0,7093                     | 0,0701 | 0,2205 | 0,7114                      | 0,0666 | 0,2219 | 4,3E-06                     | 1,22E-05 | 2E-06   |
|        | Aqueous | 0,0293                     | 0,0138 | 0,9569 | 0,0267                      | 0,0128 | 0,9606 | 6,9E-06                     | 1,05E-06 | 1,3E-05 |
| 2      | Organik | 0,6842                     | 0,0794 | 0,2364 | 0,6830                      | 0,0827 | 0,2342 | 1,4E-06                     | 1,09E-05 | 4,6E-06 |
|        | Aqueous | 0,0443                     | 0,0245 | 0,9312 | 0,0369                      | 0,0192 | 0,9438 | 5,4E-05                     | 2,77E-05 | 0,00016 |
| 3      | Organik | 0,6516                     | 0,0946 | 0,2538 | 0,6516                      | 0,0960 | 0,2524 | 4,6E-11                     | 1,97E-06 | 2E-06   |
|        | Aqueous | 0,0504                     | 0,0309 | 0,9187 | 0,0417                      | 0,0279 | 0,9304 | 7,5E-05                     | 8,93E-06 | 0,00014 |
| 4      | Organik | 0,5355                     | 0,1121 | 0,3524 | 0,5344                      | 0,1116 | 0,3540 | 1,2E-06                     | 2,29E-07 | 2,5E-06 |
|        | Aqueous | 0,0538                     | 0,0461 | 0,9001 | 0,0634                      | 0,0468 | 0,8898 | 9,3E-05                     | 4,3E-07  | 0,00011 |
| 5      | Organik | 0,3251                     | 0,1360 | 0,5389 | 0,3280                      | 0,1263 | 0,5457 | 8,2E-06                     | 9,34E-05 | 4,6E-05 |
|        | Aqueous | 0,0986                     | 0,0750 | 0,8264 | 0,0940                      | 0,0948 | 0,8112 | 2,1E-05                     | 0,000391 | 0,00023 |
| 6      | Organik | 0,7756                     | 0,0517 | 0,1726 | 0,7756                      | 0,0515 | 0,1729 | 5,8E-10                     | 4,16E-08 | 5,2E-08 |
|        | Aqueous | 0,0141                     | 0,0050 | 0,9809 | 0,0182                      | 0,0064 | 0,9754 | 1,7E-05                     | 1,92E-06 | 3,1E-05 |
| 7      | Organik | 0,8548                     | 0,0000 | 0,1452 | 0,8548                      | 0,0000 | 0,1452 | 9,9E-12                     | 0        | 9,9E-12 |
|        | Aqueous | 0,0141                     | 0,0000 | 0,9859 | 0,0143                      | 0,0000 | 0,9857 | 4,2E-08                     | 0        | 4,2E-08 |

**OF**

0,001281



4. RMSD NRTL sistem DMC(1) + Tert-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 313.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{\text{exp}}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{\text{cal}}$ ) |        |        | $(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{cal}})^2$ |          |         |
|--------|---------|-----------------------------------|--------|--------|------------------------------------|--------|--------|---|----------|---------|
|        |         | $X_1$                             | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                              | $X_2$  | $X_3$  | DMC                                       | TERT     | AIR     |
| 1      | Organik | 0,4995                            | 0,1202 | 0,3803 | 0,4994                             | 0,1188 | 0,3818 | 9,1E-10                                   | 1,91E-06 | 2E-06   |
|        | Aqueous | 0,0481                            | 0,0510 | 0,9009 | 0,0501                             | 0,0575 | 0,8924 | 4E-06                                     | 4,23E-05 | 7,2E-05 |
| 2      | Organik | 0,1979                            | 0,1068 | 0,6953 | 0,1979                             | 0,1001 | 0,6900 | 1E-10                                     | 4,46E-05 | 2,8E-05 |
|        | Aqueous | 0,0607                            | 0,0584 | 0,8809 | 0,0607                             | 0,0584 | 0,8809 | 4E-10                                     | 8,94E-10 | 1E-10   |
| 3      | Organik | 0,6168                            | 0,0955 | 0,2877 | 0,6111                             | 0,1051 | 0,2838 | 3,2E-05                                   | 9,23E-05 | 1,6E-05 |
|        | Aqueous | 0,0353                            | 0,0422 | 0,9225 | 0,0431                             | 0,0400 | 0,9169 | 6,1E-05                                   | 4,66E-06 | 3,2E-05 |
| 4      | Organik | 0,6461                            | 0,0846 | 0,2693 | 0,6425                             | 0,0910 | 0,2664 | 1,3E-05                                   | 4,21E-05 | 8,4E-06 |
|        | Aqueous | 0,0376                            | 0,0371 | 0,9253 | 0,0417                             | 0,0327 | 0,9256 | 1,6E-05                                   | 1,94E-05 | 1,2E-07 |
| 5      | Organik | 0,7843                            | 0,0407 | 0,1750 | 0,7865                             | 0,0369 | 0,1766 | 4,5E-06                                   | 1,4E-05  | 2,7E-06 |
|        | Aqueous | 0,0290                            | 0,0090 | 0,9619 | 0,0237                             | 0,0099 | 0,9664 | 2,9E-05                                   | 7,82E-07 | 2E-05   |
| 6      | Organik | 0,7094                            | 0,0648 | 0,2259 | 0,7097                             | 0,0650 | 0,2254 | 1,2E-07                                   | 2,57E-08 | 2,6E-07 |
|        | Aqueous | 0,0410                            | 0,0229 | 0,9361 | 0,0340                             | 0,0219 | 0,9441 | 5E-05                                     | 9,68E-07 | 6,5E-05 |
| 7      | Organik | 0,8242                            | 0,0000 | 0,1758 | 0,8240                             | 0,0000 | 0,1760 | 1,7E-08                                   | 0        | 1,7E-08 |
|        | Aqueous | 0,0136                            | 0,0000 | 0,9864 | 0,0191                             | 0,0000 | 0,9809 | 3,1E-05                                   | 0        | 3,1E-05 |
| OF     |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,002813                                  |          |         |
| % RMSD |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,698                                     |          |         |



5. RMSD UNIQUAC sistem DMC(1) + Iso-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 303.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{\text{exp}}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{\text{cal}}$ ) |        |        | $(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{cal}})^2$ |          |         |
|--------|---------|-----------------------------------|--------|--------|------------------------------------|--------|--------|---|----------|---------|
|        |         | $X_1$                             | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                              | $X_2$  | $X_3$  | DMC                                       | ISO      | AIR     |
| 1      | Organik | 0,0000                            | 0,5427 | 0,4573 | 0,0000                             | 0,5428 | 0,4572 | 1E-10                                     | 1,88E-10 | 1,4E-11 |
|        | Aqueous | 0,0000                            | 0,0126 | 0,9874 | 0,0000                             | 0,0123 | 0,9877 | 1E-10                                     | 1,35E-07 | 1,4E-07 |
| 2      | Organik | 0,1969                            | 0,3039 | 0,4993 | 0,1984                             | 0,3026 | 0,4990 | 2,4E-06                                   | 1,7E-06  | 5,9E-08 |
|        | Aqueous | 0,0093                            | 0,0081 | 0,9826 | 0,0084                             | 0,0080 | 0,9835 | 7,4E-07                                   | 8,77E-09 | 9,1E-07 |
| 3      | Organik | 0,2311                            | 0,2832 | 0,4857 | 0,2163                             | 0,2964 | 0,4873 | 0,00022                                   | 0,000175 | 2,5E-06 |
|        | Aqueous | 0,0082                            | 0,0071 | 0,9848 | 0,0079                             | 0,0075 | 0,9846 | 6E-08                                     | 2,28E-07 | 5,4E-08 |
| 4      | Organik | 0,2827                            | 0,2433 | 0,4740 | 0,2854                             | 0,2405 | 0,4741 | 7E-06                                     | 8,02E-06 | 3,2E-08 |
|        | Aqueous | 0,0078                            | 0,0061 | 0,9861 | 0,0088                             | 0,0061 | 0,9850 | 1,1E-06                                   | 1,57E-10 | 1,1E-06 |
| 5      | Organik | 0,4041                            | 0,1871 | 0,4089 | 0,4034                             | 0,1880 | 0,4086 | 4,2E-07                                   | 8,09E-07 | 6,3E-08 |
|        | Aqueous | 0,0120                            | 0,0057 | 0,9823 | 0,0100                             | 0,0055 | 0,9844 | 4E-06                                     | 2,72E-08 | 4,7E-06 |
| 6      | Organik | 0,5673                            | 0,1389 | 0,2938 | 0,5853                             | 0,1102 | 0,3046 | 0,00032                                   | 0,000826 | 0,00012 |
|        | Aqueous | 0,0067                            | 0,0038 | 0,9894 | 0,0094                             | 0,0032 | 0,9874 | 7,3E-06                                   | 4,6E-07  | 4,1E-06 |
| 7      | Organik | 0,8541                            | 0,0000 | 0,1459 | 0,8542                             | 0,0000 | 0,1458 | 1,5E-09                                   | 1E-10    | 8E-10   |
|        | Aqueous | 0,0141                            | 0,0000 | 0,9859 | 0,0117                             | 0,0000 | 0,9883 | 5,8E-06                                   | 1E-10    | 5,8E-06 |
| 8      | Organik | 0,0727                            | 0,4369 | 0,4904 | 0,0708                             | 0,4381 | 0,4911 | 3,4E-06                                   | 1,28E-06 | 4,9E-07 |
|        | Aqueous | 0,0039                            | 0,0116 | 0,9845 | 0,0041                             | 0,0107 | 0,9851 | 6,8E-08                                   | 7,41E-07 | 3,6E-07 |
| OF     |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,000725                                  |          |         |

6. RMSD UNIQUAC sistem DMC(1) + Iso-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 313.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{exp}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{cal}$ ) |        |        | $(X_i^{exp}-X_i^{cal})^2$ |          |         |
|--------|---------|----------------------------|--------|--------|-----------------------------|--------|--------|---------------------------|----------|---------|
|        |         | $X_1$                      | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                       | $X_2$  | $X_3$  | DMC                       | ISO      | AIR     |
| 1      | Organik | 0,8242                     | 0,0000 | 0,1758 | 0,8276                      | 0,0000 | 0,1915 | 1,2E-05                   | 0        | 0,00025 |
|        | Aqueous | 0,0136                     | 0,0001 | 0,9863 | 0,0142                      | 0,0000 | 0,9858 | 3,1E-07                   | 1E-08    | 2,1E-07 |
| 2      | Organik | 0,5392                     | 0,1022 | 0,3586 | 0,5398                      | 0,1013 | 0,3589 | 4,1E-07                   | 8,76E-07 | 9E-08   |
|        | Aqueous | 0,0144                     | 0,0037 | 0,9819 | 0,0119                      | 0,0040 | 0,9841 | 6E-06                     | 9,97E-08 | 4,6E-06 |
| 3      | Organik | 0,3890                     | 0,1564 | 0,4546 | 0,3865                      | 0,1597 | 0,4538 | 6,4E-06                   | 1,09E-05 | 6E-07   |
|        | Aqueous | 0,0077                     | 0,0058 | 0,9865 | 0,0095                      | 0,0053 | 0,9853 | 3,1E-06                   | 3,05E-07 | 1,5E-06 |
| 4      | Organik | 0,2662                     | 0,2215 | 0,5123 | 0,2652                      | 0,2226 | 0,5122 | 1,1E-06                   | 1,23E-06 | 4,8E-09 |
|        | Aqueous | 0,0085                     | 0,0069 | 0,9846 | 0,0082                      | 0,0071 | 0,9847 | 8,3E-08                   | 4,14E-08 | 7,2E-09 |
| 5      | Organik | 0,2270                     | 0,2467 | 0,5264 | 0,2366                      | 0,2371 | 0,5263 | 9,3E-05                   | 9,16E-05 | 3E-09   |
|        | Aqueous | 0,0081                     | 0,0079 | 0,9840 | 0,0079                      | 0,0075 | 0,9845 | 3,1E-08                   | 1,44E-07 | 3,1E-07 |
| 6      | Organik | 0,1914                     | 0,2681 | 0,5405 | 0,1948                      | 0,2650 | 0,5402 | 1,2E-05                   | 9,68E-06 | 1,1E-07 |
|        | Aqueous | 0,0065                     | 0,0081 | 0,9854 | 0,0068                      | 0,0081 | 0,9851 | 1,2E-07                   | 1,33E-09 | 9,7E-08 |
| 7      | Organik | 0,0000                     | 0,5254 | 0,4746 | 0,0000                      | 0,5375 | 0,4625 | 0                         | 0,000147 | 0,00015 |
|        | Aqueous | 0,0000                     | 0,0153 | 0,9847 | 0,0000                      | 0,0135 | 0,9865 | 0                         | 3,38E-06 | 3,4E-06 |
| 8      | Organik | 0,0571                     | 0,4456 | 0,4974 | 0,0549                      | 0,4328 | 0,5123 | 5E-06                     | 0,000162 | 0,00022 |

|               |        |        |        |        |        |        |         |          |         |
|---------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|----------|---------|
| Aqueous       | 0,0044 | 0,0132 | 0,9823 | 0,0023 | 0,0118 | 0,9859 | 4,6E-06 | 1,99E-06 | 1,3E-05 |
| <b>OF</b>     |        |        |        |        |        |        |         | 0,00328  |         |
| <b>% RMSD</b> |        |        |        |        |        |        |         | 0,645    |         |

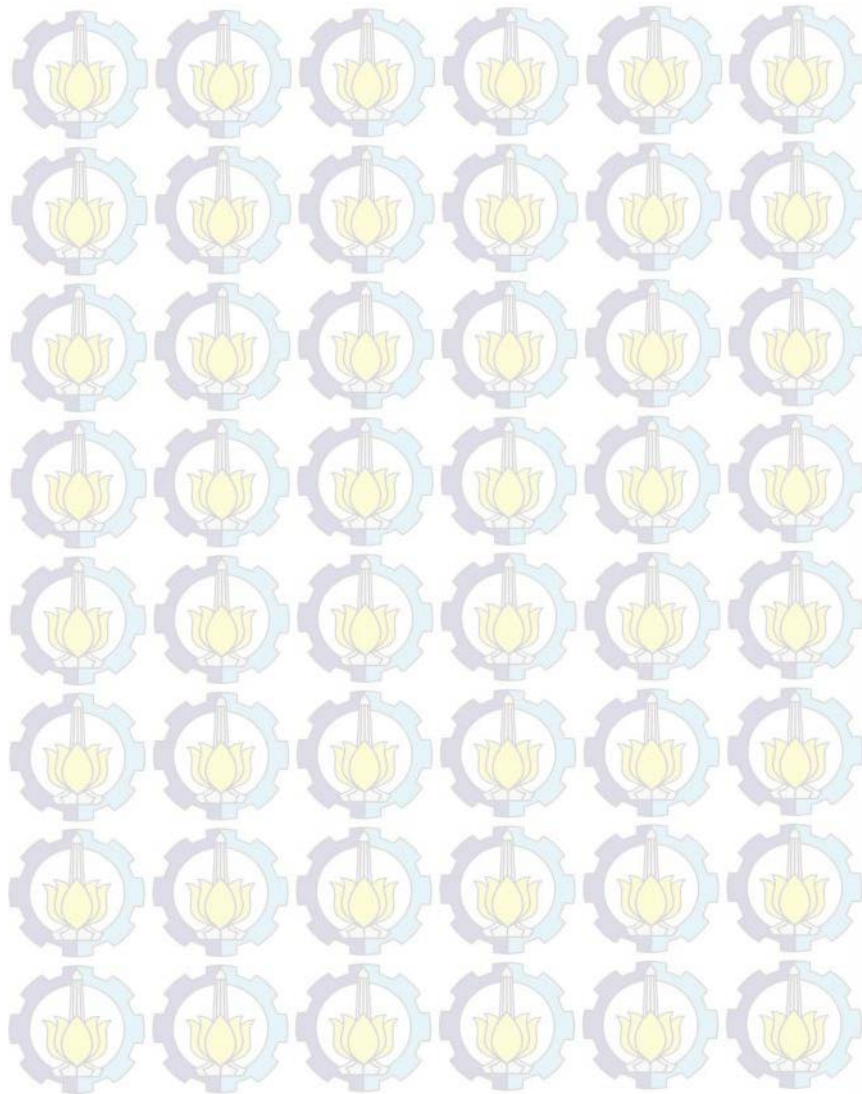
7. RMSD UNIQUAC sistem DMC(1) + Tert-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 303.15 K

| Sampel    | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{exp}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{cal}$ ) |        |        | $(X_i^{exp}-X_i^{cal})^2$ |          |         |
|-----------|---------|----------------------------|--------|--------|-----------------------------|--------|--------|---------------------------|----------|---------|
|           |         | $X_1$                      | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                       | $X_2$  | $X_3$  | DMC                       | TERT     | AIR     |
| 1         | Organik | 0,7093                     | 0,0701 | 0,2205 | 0,7114                      | 0,0668 | 0,2218 | 4,1E-06                   | 1,11E-05 | 1,7E-06 |
|           | Aqueous | 0,0293                     | 0,0138 | 0,9569 | 0,0261                      | 0,0123 | 0,9615 | 1E-05                     | 2,09E-06 | 2,1E-05 |
| 2         | Organik | 0,6842                     | 0,0794 | 0,2364 | 0,6834                      | 0,0814 | 0,2352 | 6,6E-07                   | 4,02E-06 | 1,4E-06 |
|           | Aqueous | 0,0443                     | 0,0245 | 0,9312 | 0,0424                      | 0,0210 | 0,9366 | 3,7E-06                   | 1,22E-05 | 2,9E-05 |
| 3         | Organik | 0,6516                     | 0,0946 | 0,2538 | 0,6484                      | 0,1007 | 0,2510 | 1E-05                     | 3,7E-05  | 8,2E-06 |
|           | Aqueous | 0,0504                     | 0,0309 | 0,9187 | 0,0482                      | 0,0324 | 0,9193 | 4,6E-06                   | 2,34E-06 | 3,8E-07 |
| 4         | Organik | 0,5355                     | 0,1121 | 0,3524 | 0,5336                      | 0,1149 | 0,3514 | 3,4E-06                   | 8,03E-06 | 9,9E-07 |
|           | Aqueous | 0,0538                     | 0,0461 | 0,9001 | 0,0575                      | 0,0429 | 0,8996 | 1,4E-05                   | 1,05E-05 | 2,1E-07 |
| 5         | Organik | 0,3251                     | 0,1360 | 0,5389 | 0,3292                      | 0,1313 | 0,5395 | 1,7E-05                   | 2,2E-05  | 3,3E-07 |
|           | Aqueous | 0,0986                     | 0,0750 | 0,8264 | 0,0833                      | 0,0896 | 0,8271 | 0,00023                   | 0,000211 | 5,4E-07 |
| 6         | Organik | 0,7756                     | 0,0517 | 0,1726 | 0,7753                      | 0,0522 | 0,1725 | 1E-07                     | 1,78E-07 | 1,1E-08 |
|           | Aqueous | 0,0141                     | 0,0050 | 0,9809 | 0,0170                      | 0,0059 | 0,9771 | 8,4E-06                   | 8,87E-07 | 1,5E-05 |
| 7         | Organik | 0,8548                     | 0,0000 | 0,1452 | 0,8547                      | 0,0000 | 0,1453 | 8,9E-09                   | 0        | 8,9E-09 |
|           | Aqueous | 0,0141                     | 0,0000 | 0,9859 | 0,0185                      | 0,0000 | 0,9815 | 1,9E-05                   | 0        | 1,9E-05 |
| <b>OF</b> |         |                            |        |        |                             |        |        | 0,000965                  |          |         |

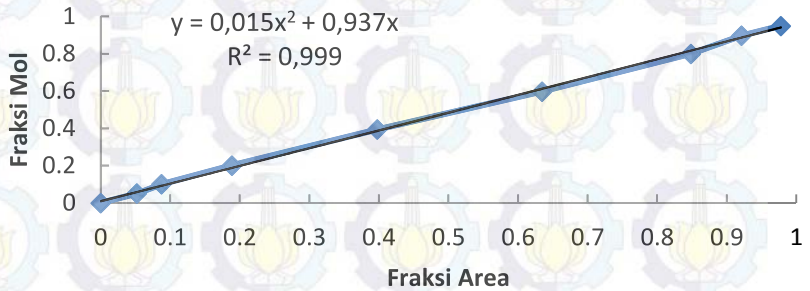


8. RMSD UNIQUAC sistem DMC(1) + Tert-Butanol(2) + Air(3) pada temperatur 313.15 K

| Sampel | Fase    | Eksperimen ( $X_i^{\text{exp}}$ ) |        |        | Perhitungan ( $X_i^{\text{cal}}$ ) |        |        | $(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{cal}})^2$ |          |         |
|--------|---------|-----------------------------------|--------|--------|------------------------------------|--------|--------|---|----------|---------|
|        |         | $X_1$                             | $X_2$  | $X_3$  | $X_1$                              | $X_2$  | $X_3$  | DMC                                       | TERT     | AIR     |
| 1      | Organik | 0,1979                            | 0,1068 | 0,6953 | 0,1918                             | 0,1052 | 0,7030 | 3,7E-05                                   | 2,5E-06  | 5,8E-05 |
|        | Aqueous | 0,0570                            | 0,0439 | 0,8991 | 0,0680                             | 0,0493 | 0,8827 | 0,00012                                   | 2,83E-05 | 0,00027 |
| 2      | Organik | 0,4995                            | 0,1202 | 0,3803 | 0,4989                             | 0,1158 | 0,3853 | 3,7E-07                                   | 1,89E-05 | 2,5E-05 |
|        | Aqueous | 0,0291                            | 0,0289 | 0,9420 | 0,0417                             | 0,0296 | 0,9287 | 0,00016                                   | 4,47E-07 | 0,00018 |
| 3      | Organik | 0,6168                            | 0,0955 | 0,2877 | 0,6160                             | 0,0949 | 0,2890 | 5,8E-07                                   | 3,04E-07 | 1,7E-06 |
|        | Aqueous | 0,0287                            | 0,0228 | 0,9514 | 0,0319                             | 0,0232 | 0,9448 | 1,1E-05                                   | 1,7E-07  | 4,4E-05 |
| 4      | Organik | 0,6461                            | 0,0846 | 0,2693 | 0,6484                             | 0,0824 | 0,2692 | 5,4E-06                                   | 4,59E-06 | 3,5E-08 |
|        | Aqueous | 0,0355                            | 0,0199 | 0,9417 | 0,0305                             | 0,0205 | 0,9490 | 2,5E-05                                   | 3,89E-07 | 5,3E-05 |
| 5      | Organik | 0,7667                            | 0,0430 | 0,1903 | 0,7615                             | 0,0581 | 0,1805 | 2,8E-05                                   | 0,000226 | 9,5E-05 |
|        | Aqueous | 0,0289                            | 0,0151 | 0,9560 | 0,0214                             | 0,0145 | 0,9641 | 5,6E-05                                   | 3,76E-07 | 6,5E-05 |
| 6      | Organik | 0,7094                            | 0,0648 | 0,2259 | 0,7195                             | 0,0468 | 0,2337 | 0,0001                                    | 0,000324 | 6,2E-05 |
|        | Aqueous | 0,0282                            | 0,0148 | 0,9570 | 0,0234                             | 0,0106 | 0,9659 | 2,2E-05                                   | 1,74E-05 | 7,9E-05 |
| 7      | Organik | 0,8242                            | 0,0000 | 0,1758 | 0,8240                             | 0,0000 | 0,1760 | 2,7E-08                                   | 0        | 2,7E-08 |
|        | Aqueous | 0,0136                            | 0,0000 | 0,9864 | 0,0152                             | 0,0000 | 0,9848 | 2,5E-06                                   | 0        | 2,5E-06 |
| OF     |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,001699                                  |          |         |
| % RMSD |         |                                   |        |        |                                    |        |        | 0,563                                     |          |         |

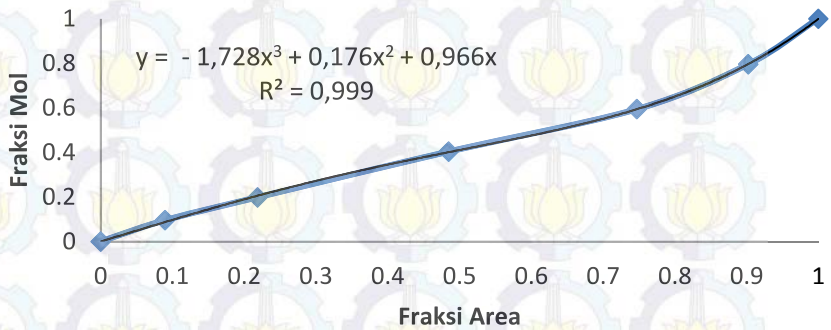


### DMC (+Tert)



9. Kurva kalibrasi DMC + Tert-Butanol

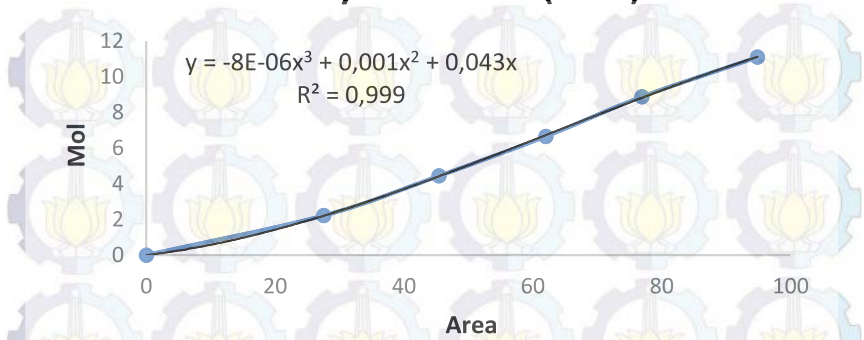
### Air+ (Tert)



10. kurva kalibrasi Air + Tert-Butanol

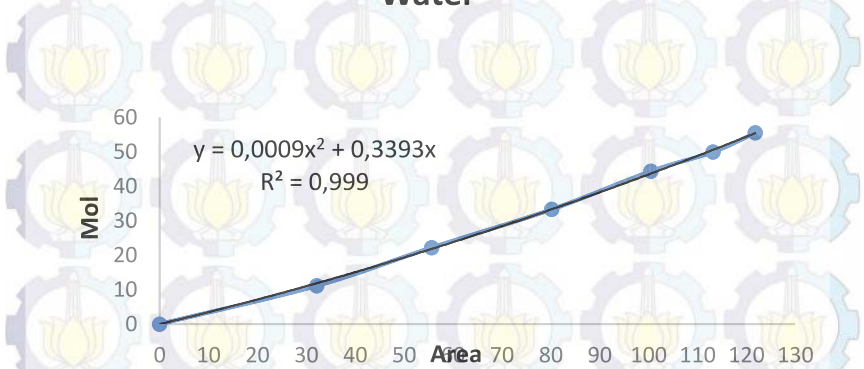


## Dimethyl Carbonate (DMC)



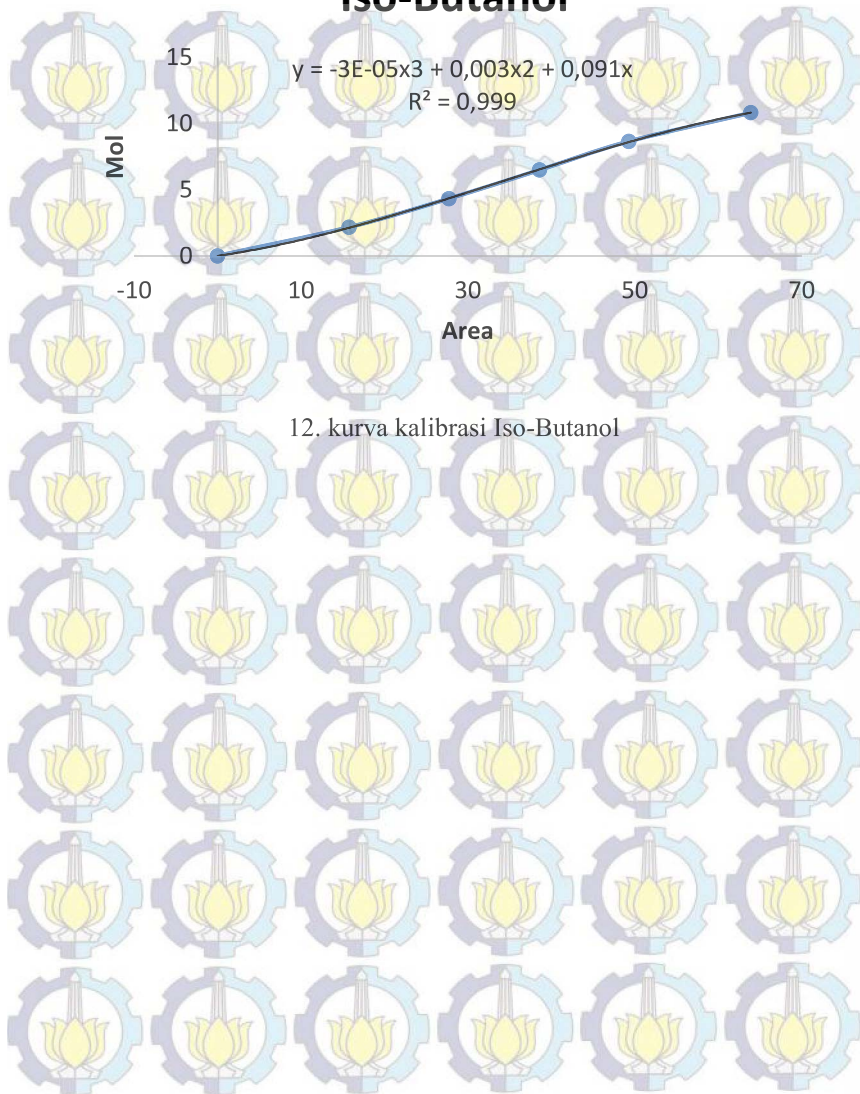
11. kurva kalibrasi Dimethyl Carbonate (DMC)

## Water



12. kurva kalibrasi Air

## Iso-Butanol



12. kurva kalibrasi Iso-Butanol

